



TITLE:

CTMRGによる拡張イジングモデル の解析

AUTHOR(S):

入江, 崇

CITATION:

入江, 崇. CTMRGによる拡張イジングモデルの解析. 物性研究 1997,
69(2): 254-298

ISSUE DATE:

1997-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96171>

RIGHT:

CTMRGによる拡張イジングモデルの解析

東北大学 大学院 理学研究科 物理学専攻 入江 崇

概要

臨界指数が系の詳細によらず一定の値をもつことを、臨界現象の普遍性 (universality) という。普遍性には例外があり、たとえば、最近接相互作用 J と次近接相互作用 J' をもつ正方格子イジングモデル (J - J' モデル) は相互作用の大きさの比により臨界指数が変化する。また、次近接相互作用 J' と (最近接の) 4 体相互作用 J_4 をもつモデル (J' - J_4 モデル) も臨界指数に相互作用依存性があり普遍性が破れている。本論文の目的は、この二つのモデルを含む J - J' - J_4 モデルの臨界指数を数値計算し、相互作用とスピンの大きさに対する臨界指数の依存性をしらべることである。

数値計算で臨界指数を求めるために、有限系のデータを有限サイズスケーリングにより解析した。有限系の物理量を計算するには、角転送行列くりこみ群 (Corner Transfer Matrix Renormalization Group, CTMRG) の方法をもちいた。CTMRG は、角転送行列 (CTM) を密度行列くりこみ群に導入した方法で、サイズの大きな系の物理量を精度良く計算でき、有限サイズスケーリングによる解析に有効である。

結果として、 J - J' - J_4 モデルでは、基底スピン配列が 4 重に縮退している領域で普遍性が破れており、基底状態が強磁性または反強磁性の配置のどちらかに限定される場合は普遍性が保たれることが確認された。このモデルにおいて普遍性が破れ得るのは、性質が異なる基底状態が縮退していて秩序パラメータが二つの成分をもつ場合であることが検証された。また、臨界指数に相互作用依存性がある領域で、スピン $\frac{1}{2}$ とスピン 1 のときの臨界指数 ν を比較すると、両者は計算誤差の範囲内で一致した。このモデルでは、相互作用の比により普遍性が破れている場合でも、臨界指数がスピンの大きさには依存しないと結論される。

目次

概要

1	はじめに	256
2	スケーリング理論	258
2.1	臨界指数	258
2.2	スケーリング理論	259
2.3	有限サイズスケーリング	263
3	イジングモデルにおける普遍性の破れ	265
3.1	普遍性を破る二つのモデル	265
3.2	モデルの拡張	270
3.3	J - J' - J_4 モデルの基本的な性質	271
4	数値計算方法	274
4.1	CTMRG の方法	274
4.2	物理量の計算方法	284
4.3	有限サイズスケーリングによる臨界指数の評価	285
5	計算結果	289
5.1	$S = \frac{1}{2}$ J - J' - J_4 モデルの臨界指数	289
5.2	臨界指数の S 依存性	292
6	まとめと考察	295
	謝辞	296
	参考文献	296

第1章

はじめに

相転移は、さまざまな物質に普遍的な物理現象の一つである。たとえば磁性体は、臨界温度 T_c より高い温度では各原子のスピン向きは不ぞろいで系全体の磁化はゼロだが、温度が T_c より低くなるとスピンは平均としてある方向にそろい自発磁化が現われる。このように、相転移とは物質が無秩序な状態から、秩序をもった状態に変化することである。系の秩序状態を特徴づける磁化などの量は、秩序パラメータとよばれる [1]。

臨界点で秩序パラメータが連続な場合は2次相転移とよばれ、秩序パラメータが臨界点で不連続である1次相転移と区別される。2次相転移では、秩序パラメータ A は臨界点付近で $A \sim |T - T_c|^\beta$ の特異性をもち、 β を A の臨界指数とよぶ [2]。同様に、エネルギーや自由エネルギーなども臨界点で特異であり、それぞれに対応した臨界指数を定義できる。

これまでに数多くの系について、理論・実験の両面から臨界指数の値がしらべられてきた。その結果、等しい臨界指数をもつ一群の系が存在することが明らかになった [3, 4]。このように、系の詳細によらずに臨界指数が一定の値をもつことを臨界現象の普遍性 (universality) [5] とよぶ。

臨界現象の普遍性は、一連のスケーリング理論の発展により説明された。その起源は、ウィドム (Widom, 1965) [6] によるスケーリングの概念である。彼は臨界点付近で温度 T などの外部変数の単位を定数倍したとき — これを温度 T のスケーリングとよぶ — の自由エネルギーの変化について考察し、異なる臨界指数の間に簡単な関係式が成立することを説明した。スケーリングの物理的根拠は、カダノフ (Kadanoff, 1966) [7] によって与えられた。彼はイジングモデルを例にとり、「空間的に近接した複数個のスピンを集まりを一つのスピンとみなす」というブロックスピンの概念を導入し、スケーリングが微視的に説明できることを示した。ウィルソン (Wilson, 1971) [8] はカダノフの考えを押し進め、くりこみ群の方法に到達した。そして、臨界指数が物理系の詳細に依存しない側面を持つことが明らかにされた。これは、普遍性仮説 (universality hypothesis) [5] とよばれ次のようにまとめることができる：「臨界指数の値は、系の次元数、相互作用の対称性と到達距離のみに依存する」。

普遍性仮説はこれまでに多くの系で実証されており [9]、広く成立すると信じられてきた。

しかし、例外が存在することが明らかになっている [10 - 17]. たとえば、最近接相互作用 J と次近接相互作用 J' をもつスピン $\frac{1}{2}$ の正方格子イジングモデル (以下 $S = \frac{1}{2}$, J - J' モデルとよぶ) は, $J'/|J| < -0.5$ の領域では, 臨界指数が $J'/|J|$ 依存性をもち, 普遍性仮説に反している [10 - 15]. また, 次近接相互作用 J' と (最近接の) 4 体相互作用 J_4 があるスピン $\frac{1}{2}$ のモデル (以下 $S = \frac{1}{2}$, J' - J_4 モデルとよぶ) も相互作用の大きさの比により臨界指数が変化する [16, 17].

それでは, どのような場合に普遍性が破れるのだろうか. J - J' モデルと J' - J_4 モデルは, 臨界指数が変化する領域では基底スピン配列に著しい縮退があるという共通点をもつ [18, 19]. 本論文では, J - J' モデルと J' - J_4 モデルを融合した J - J' - J_4 モデルについて考察する. このモデルもまた普遍性を破ることが, 限られたパラメータ領域での数値計算により確認されている [20]. しかし, まだ広いパラメータ領域で, 臨界指数が未知のままである. 本論文のまず一つ目の目的は, J - J' - J_4 モデルの臨界指数を決定し, 普遍性が破れているパラメータ領域を確認することである.

以上では, 臨界指数が相互作用に依存するという意味で普遍性が破れていた. もう一つの問題として, スピンの大きさ S の変化に対して, 臨界指数が変化するかどうかという点があげられる [21, 22]. 最近接相互作用のみの正方格子イジングモデルでは, $S = 1$ の場合の臨界指数が $S = \frac{1}{2}$ の場合と等しいことが確認されている [21]. 本田ら [22] は $S = 1$ の J - J' モデルに対して, 臨界指数 ν を計算し, $S = \frac{1}{2}$ J - J' モデルの ν' [12] と比較し, $\nu < \nu'$ という結論を得た. ただし, 計算誤差が大きく, 両者の差異が有意であるかどうかは, 議論の余地がある. 本論文の二つ目の目的は, 本田らの結果をより精密に検証しなおし, 相互作用に競合があるイジングモデル (J - J' - J_4 モデル) の臨界指数が S に依存するかどうかをしらべることである.

本論文では, 臨界指数を得るために角転送行列くりこみ群 (Corner Transfer Matrix Renormalization Group, CTMRG) をもちいる. 西野と奥西 [26 - 28] により導入されたこの方法は, バクスター (Baxter) の角転送行列 (Corner Transfer Matrix, CTM) [17, 29, 30] を密度行列くりこみ群 [31, 32] に導入したもので, 2 次元古典系の分配関数を高い精度で算出するという特徴をもつ. また, 従来よりもちいられてきたモンテカルロくりこみ群 [12, 23], コヒーレント異常法 [24, 25] などに比べ, 計算量が少なく, 相互作用に競合のある系に対しても安定していることが知られている. CTMRG により得られた結果を有限サイズスケールリング理論 [33, 34] で解析することにより, 臨界指数を評価する [27].

本論文では, CTMRG 法をもちいて, J - J' - J_4 モデルについて, 臨界指数の相互作用とスピンの大きさに対する依存性をしらべていく. 次章では, 普遍性仮説の理論的な基礎づ

けであるスケーリング理論の概要を説明する。第3章で J - J' モデルおよび J' - J_4 モデルを取り上げる。また、この二つのモデルを包含する J - J' - J_4 モデルを導入する。第4章では CTMRG 法による臨界指数の計算方法を説明する。第5章で計算結果を示し、第6章でまとめと考察をおこなう。

第2章

スケーリング理論

2.1 臨界指数

臨界現象の特徴として、臨界点では種々の物理量が特異性を示す。たとえば温度 T に関する特異性は、臨界温度 T_c からのずれ $T - T_c$ のべき乗で記述されることが知られており、その指数を臨界指数 [2] とよぶ。磁性体を例にあげると、臨界温度 T_c 近傍での自発磁化 M の特異性は、臨界指数 β をもちいて、

$$M \sim (T_c - T)^\beta \quad (2.1)$$

と書ける。記号 \sim は、 $T \rightarrow T_c$ の極限で両辺の比がゼロでない一定値に収束するという意味である。

他にもいくつか磁性体で定義される臨界指数をまとめておこう。温度 T 、磁場 H のかわりに規格化された量 $t = (T - T_c)/T_c$ 、 $h = H/k_B T$ をもちいると、比熱 C 、磁化 M 、帯磁率 χ 、相関長 ξ の特異性は次のように表わせる：

$$C(t, 0) \sim |t|^{-\alpha} \quad (2.2)$$

$$M(t, 0) \sim (-t)^\beta \quad (2.3)$$

$$\chi(t, 0) \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.4)$$

$$M(0, h) \sim h^{\frac{1}{\delta}} \quad (2.5)$$

$$\xi(t, 0) \sim t^{-\nu} \quad (2.6)$$

また、相関関数 $\Gamma(r, t)$ ($= \langle s_0 s_r \rangle$) は臨界点上で、

$$\Gamma(r, 0) \sim r^{-(d-2+\eta)} \quad (2.7)$$

と書ける。 d は系の次元数, r は格子定数を単位とするスピン間の距離である。

これまでにさまざまな物質や理論的モデルで臨界指数の値がしらべられてきた。その結果, まったく異なる系が共通の臨界指数をもつ場合があることが明らかになった [3, 4, 9]。また, それぞれの系の種々の物理量に対する臨界指数を分析すると, 同一の系の臨界指数の間にいくつかの関係式があることが知られている [3, 35, 36]。臨界指数のこれらの特徴は, スケーリング理論により説明できる。

2.2 スケーリング理論

ウィドムのスケーリング

ウィドム (Widom) [6] は, 臨界指数に成立する関係式を導くために, 臨界点付近では自由エネルギーの特異部 $f(t, h)$ が任意の λ に対して次の等式をみたすと仮定した:

$$f(\lambda^p t, \lambda^q h) = \lambda f(t, h). \quad (2.8)$$

すなわち, 二つのパラメータ p と q があり, 温度 t を λ^p 倍, 磁場 h を λ^q 倍に変換しても, 自由エネルギーの特異部は定数因子 λ 倍しか変わらないと仮定した。これはスケーリング仮説とよばれる。(2.8) を t や h に関して微分し物理量の表式を求めれば, 多くの臨界指数は, 二つのパラメータ p と q のみで表わせることがわかる。たとえば, (2.8) を h で微分すれば, 磁化の関係式

$$\lambda^q M(\lambda^p t, \lambda^q h) = \lambda M(t, h) \quad (2.9)$$

が得られる。ここで $\lambda = (-t)^{-\frac{1}{p}}, h = 0$ とすると,

$$\begin{aligned} M(t, 0) &= (-t)^{\frac{1-q}{p}} M(-1, 0) \\ &\sim (-t)^{\frac{1-q}{p}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

となる。この (2.10) と (2.3) を比べれば

$$\beta = \frac{1-q}{p} \quad (2.11)$$

が成立し, 臨界指数が二つのパラメータ p と q で表わせる。他の臨界指数 α, γ, δ についても同様に p と q で表わせることが示せるので, 臨界指数は互いに独立ではないことがわかる。

カダノフのスケーリング

カダノフ (Kadanoff)[7] は、イジングモデルを例にとりスケーリング仮説に直感的な解釈を与えた。最近接相互作用をする d 次元のイジングモデルを考え、この系を図 2.1 のようにブロックに分割する。ブロックの大きさ La は、スピン間距離 a より大きく、相関長 ξ より小さい任意の大きさとする。すなわち、 $a \ll La \ll \xi$ である。この条件がみたされていけば、ブロック内の L^d 個のスピンはほとんど同じ方向をむくだろう。そこでカダノフは、各ブロック内のスピンをまとめて新しい一つのイジングスピンにおきかえられると仮定した。ブロック化後の系の格子構造はもとの系とおなじであり、ブロック化した系の自由エネルギーはもとの系の自由エネルギー $f(t, h)$ をもちいて表わすことができるだろう。ただし、系の実効的な温度と磁場が、 (t, h) から (t_L, h_L) に変化したことに注意が必要である。一つのブロックには L^d 個のスピンがはいっているの、変換後の系のブロックあたりの自由エネルギー $f(t_L, h_L)$ と、もとの系のスピンあたりの自由エネルギー $f(t, h)$ には次の関係が成立する：

$$f(t_L, h_L) = L^d f(t, h). \quad (2.12)$$

また、ブロック化された系での実効的な温度 t_L と磁場 h_L は L に依存するので、

$$t_L = L^y t \quad (2.13)$$

$$h_L = L^x h \quad (2.14)$$

になるとする。ここで x と y は適当な指数である。(2.13) と (2.14) を (2.12) に代入することにより、

$$f(L^y t, L^x h) = L^d f(t, h) \quad (2.15)$$

となる。これはウィドムのスケーリング仮説 (2.8) そのものであり、(2.8) で $\lambda = L^d$ とすれば、 $y = dp, x = dq$ を得る。

また、カダノフはこのブロック化の方法にしたがい、スピン相関関数 $\Gamma(r, t)$ に対しても、

$$\Gamma(L^{-1}r, L^y t) = L^{2(d-x)} \Gamma(r, t) \quad (2.16)$$

とスケーリングできることを示し、臨界指数 ν, η をパラメータ x, y で表わした。以下に結

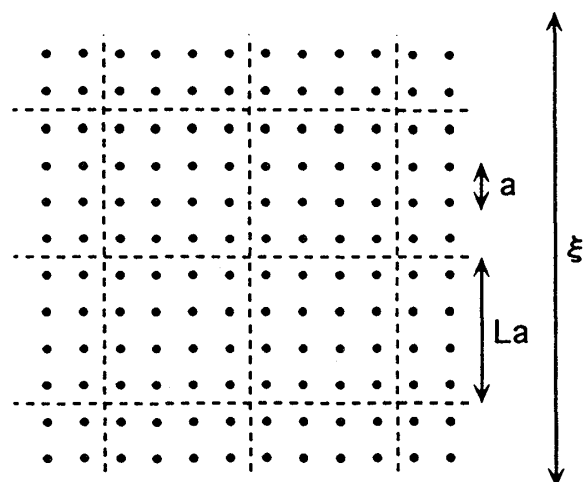


図 2.1: 一辺 La のブロックへの分割. 図では $L = 4$ になっている.

果のみ示す：

$$x = \frac{d-2+\eta}{2} \quad (2.17)$$

$$y = \frac{1}{\nu} \quad (2.18)$$

カダノフの結果は、平均場近似とは異なる臨界指数が存在し得ることを微視的に示した点で重要である.

くりこみ群の方法

カダノフの考え方を発展させて、ウィルソン (Wilson)[8] は臨界指数を具体的に計算する方法を導いた. これはくりこみ群の方法とよばれる. ウィルソンの方法は、臨界点付近でのハミルトニアン of 系統的なスケール変換をとり扱う.

スピン変数 $\{s\}$ をもつイジングモデルの (温度 T を含めた) ハミルトニアン $H(s)/k_B T$ が次の形をしているとしよう：

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B T} H(s) = & K_1 \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + K_2 \sum_{\langle ij \rangle_2} s_i s_j + K_3 \sum_{\langle ij \rangle_3} s_i s_j + \cdots \\ & + K_{4,1} \sum_{\langle ijkl \rangle} s_i s_j s_k s_l + \cdots \\ & + \cdots \end{aligned} \quad (2.19)$$

ただし, $K = (K_1, K_2, \dots)$ は無限次元のベクトルで, すべての相互作用定数 K_1, K_2, \dots を含む. この系をスケール L でブロック化すると, スピン変数 $\{s\}$ が, L^d 個のスピンにより構成される新しいスピン変数 $\{s'\}$ にうつり, 実効的な温度は T_L になる. また, ハミルトニアンは関数の形を変えないと仮定する:

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B T_L} H(s') = & K_{1L} \sum_{\langle ij \rangle} s'_i s'_j + K_{2L} \sum_{\langle ij \rangle_2} s'_i s'_j + K_{3L} \sum_{\langle ij \rangle_3} s'_i s'_j + \dots \\ & + K_{4,1L} \sum_{\langle ijkl \rangle} s'_i s'_j s'_k s'_l + \dots \\ & + \dots \end{aligned} \quad (2.20)$$

このブロック化により, ベクトル K は次のような変換を受ける:

$$K_L = T(K). \quad (2.21)$$

ここで, T は K から K_L への (一般には非線形な) 写像で, スケール L で系をブロック化する操作を表わす. 系が臨界点からずれているときは相関長は有限なので, ブロック化により変換後の (実効的な) 相関長は小さくなる. よって, ブロック化をくり返せば系は臨界点から遠ざかる. 一方, もし系が臨界点 K_c にあれば相関長は無限大なので, K_c はブロック化に対して不変になるはずである:

$$K_c = T(K_c). \quad (2.22)$$

簡単のために, 相互作用が (近似的に) 2次元ベクトル $K = (K_1, K_2)$ で閉じている場合で考え, ベクトル K の $K_c = (K_{1c}, K_{2c})$ からの小さなずれを $K - K_c = (\Delta K_1, \Delta K_2)$ とかいてみよう. (2.21) を K_c のまわりで線形化すると,

$$\begin{pmatrix} \Delta K_{1L} \\ \Delta K_{2L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_1 \\ \Delta K_2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

と表わせる. ここで A_{ij} は, ブロック化の手続きを具体的に与えると決定される. (2.23) は線形変換であるから, 二つの固有ベクトル,

$$\lambda_1 \begin{pmatrix} \Delta K_{11} \\ \Delta K_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_{11} \\ \Delta K_{21} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

$$\lambda_2 \begin{pmatrix} \Delta K_{12} \\ \Delta K_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_{12} \\ \Delta K_{22} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

を扱うと都合がいい。

1 より大きな固有値 λ をもつ固有ベクトルは、ブロック化をくり返せば臨界点から遠ざかる ($\lambda^n \gg 1$)。これは、変換のたびに実効温度 T_L が T_c から遠のくことに対応している。逆に、1 より小さい固有値に対応する固有ベクトルの大きさは、変換をくり返すとしだいに小さくなる。いまの場合、 $\lambda_1 > 1, \lambda_2 < 1$ とすれば、ブロック化による実効温度 t の変化は λ_1 で特徴づけられる：

$$t_L = \lambda_1 t. \quad (2.26)$$

また、このとき相関長 $\xi \sim t^{-\nu}$ はブロック化により $\xi_L = \xi/L$ になるので、

$$\begin{aligned} t_L &\sim \xi_L^{-\frac{1}{\nu}} = \left(\frac{\xi}{L}\right)^{-\frac{1}{\nu}} \\ &\sim \left(\frac{t^{-\nu}}{L}\right)^{-\frac{1}{\nu}} = L^{\frac{1}{\nu}} t \end{aligned} \quad (2.27)$$

と書ける。(2.26) と (2.27) を比べると、臨界指数 ν が

$$\nu = \frac{\log L}{\log \lambda_1} \quad (2.28)$$

と与えられることがわかる。臨界指数 ν の値が λ_2 にはよらないことに注意しよう。このように、臨界指数の値が、スケール変換の 1 より小さい (irrelevant な) 固有値に依存しないことは、臨界現象の普遍性 (universality) とよばれる。

以上のように、スケーリング理論により臨界指数の普遍的な側面が説明されることがわかった。グリフィス (Griffiths)[5] はウィルソンの理論以前に、臨界指数について次のように述べている：「臨界指数の値は、系の細かい性質にはよらず、系の次元数、相互作用の対称性と到達距離のみに依存する」。この普遍性仮説は、提起されて以来よく実証されており [9]、広く成立すると信じられてきた。しかし、普遍性仮説をみたさないモデルが存在することが明らかになっている [10 - 16]。

2.3 有限サイズスケーリング

カダノフのブロック化の理論は有限の大きさの系の解析に応用できる。この方法は有限サイズスケーリング [33, 34] とよばれる。

大きさ N^d (2次元の場合 $N \times N$) の系をブロック化しよう. この有限系の自由エネルギーの特異部 $f(t, h, N)$ を, (2.12) と同じようにスケーリングすると,

$$f(L^y t, L^x h, \frac{N}{L}) = L^d f(t, h, N) \quad (2.29)$$

と書ける. 以前と同様に, L はブロックの長さである. ブロック化のあとでは, 系の実効的な大きさは N/L になっている. (2.29) を温度 t と磁場 h でそれぞれ微分すると, エネルギー E と磁化 M の式を得る:

$$L^y E(L^y t, L^x h, \frac{N}{L}) = L^d E(t, h, N) \quad (2.30)$$

$$L^x M(L^y t, L^x h, \frac{N}{L}) = L^d M(t, h, N). \quad (2.31)$$

ただし, エネルギーの原点は臨界点での値 $E(0, 0, \infty)$ にとってある. ここで, $t = 0, h = 0$ とすると,

$$E(0, 0, N) = L^{y-d} E(0, 0, \frac{N}{L}) \quad (2.32)$$

$$M(0, 0, N) = L^{x-d} M(0, 0, \frac{N}{L}) \quad (2.33)$$

となる. この式は臨界温度における有限系の式である. 臨界点では相関長 ξ は十分に長く, 系のサイズ N と同程度に伸びている. よって, ブロックの大きさ L を $L \sim N$ とスケールしてもいいだろう. すると,

$$E(0, 0, N) \sim N^{y-d} \quad (2.34)$$

$$M(0, 0, N) \sim N^{x-d} \quad (2.35)$$

と書け, これを有限サイズスケーリング則とよぶ. この二つの式に (2.17) と (2.18) を代入すれば, ν と η をもちいて

$$E(0, 0, N) \sim N^{\frac{1}{\nu}-d} \quad (2.36)$$

$$M(0, 0, N) \sim N^{-\frac{1}{2}(d-2+\eta)} \quad (2.37)$$

と表わせる. これらの関係式は有限系を扱う数値計算のデータ解析に有用である.

第3章

イジングモデルにおける普遍性の破れ

3.1 普遍性を破る二つのモデル

イジングモデルは、格子スピンのモデルのなかでもっとも単純なモデルであり、性質が詳しく研究されている [37 - 42]. このモデルはもともと、磁性体を非常に単純化したモデルとして考案された [37, 38]. その後の研究で、2次元以上のイジングモデルは秩序 - 無秩序相転移を起こすことがわかり [39], 相転移の理論的研究の対象として詳しくしらべられてきた [40 - 42]. とくに、スピン $\frac{1}{2}$ の最近接2次元正方格子イジングモデルは、オンサーガー (Onsager) [41] によって初めて厳密に解かれた.

臨界現象の普遍性仮説 [5] によれば、臨界指数の値は、系の次元数や相互作用の対称性、到達距離のみに依存し、系の細かい性質には関係しない. この仮説は同時に、臨界指数の値をきめる本質的な要素が何であるかを、イジングモデルのような簡単なモデルをもちいて探ることができることを意味する. これまでにいろいろな種類のイジングモデルで臨界指数の値が計算されてきた. その結果、臨界指数は系の詳細によらずに定まることが、多くのモデルで検証されている [21, 43 - 46].

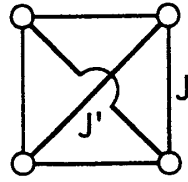
しかし、普遍性仮説が保たれていないイジングモデルも存在することが確認されている [10 - 16]. 以下で、そのようなモデルの例を二つ取りあげる.

最近接相互作用 J と次近接相互作用 J' をもつモデル (J - J' モデル)

最近接相互作用 J と次近接相互作用 J' をもつスピン $\frac{1}{2}$ の正方格子イジングモデル (以下 $S = \frac{1}{2}$ J - J' モデルとよぶ) は、臨界指数にパラメータ依存性のあるモデルとして過去に多くの研究がある [10 - 15]. このモデルのハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - J' \sum_{\langle ik \rangle} s_i s_k \quad (3.1)$$

で表わされる. J, J' はそれぞれ、最近接、次近接相互作用を表わす定数である. s_i は格子点 i におけるイジングスピン変数を表わす; $s_i = \pm 1$. 最初の和と二番目の和は、それぞれ、最近接、次近接格子対についてとる (図 3.1). このモデルは、二つの相互作用の比が $J'/|J| < -\frac{1}{2}$

図 3.1: 最近接相互作用 J と次近接相互作用 J' .

の場合には臨界指数の値が $J'/|J|$ に依存することがわかっている. $J'/|J| > -\frac{1}{2}$ の場合は普遍性が保たれている. このモデルの性質を以下にまとめる.

$J'/|J| > -\frac{1}{2}$ の領域

- 二つの相互作用の比 $J'/|J|$ によらず臨界指数は常に一定であり, その値は最近接のみの場合 ($J' = 0$) とおなじになる ($\nu = 1$).
- 基底スピン配列は, $J > 0$ のとき強磁性状態 (F 状態), $J < 0$ のとき反強磁性状態 (AF 状態) になる.

$J'/|J| = -\frac{1}{2}$ の境界上

- 有限温度で相転移しない ($T_c = 0$).
- 基底状態が無限に縮退している.

$J'/|J| < -\frac{1}{2}$ の領域

- 二つの相互作用の比 $J'/|J|$ の変化とともに臨界指数が連続的に変化する.
- 基底スピン配列は, 図 3.2 のような超反強磁性 (super-anti-ferromagnetic) 状態とよばれる配置をとる (以後この状態を SAF 状態と略する).

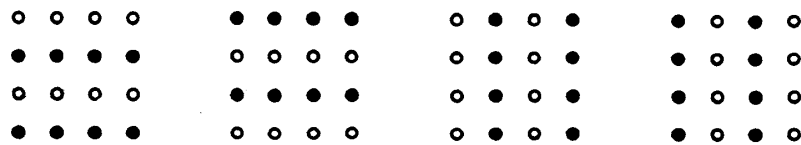


図 3.2: SAF 状態のスピン配置. 黒まると白まるとは, それぞれ上向きと下向きのスピンを表す. 4通りの配置が縮退している.

基底状態のスピン配置ごとに (J, J') 平面を三つの領域にわけて, 図 3.3 に示した. 図 3.3 の斜線部は臨界指数が相互作用の比とともに変化する領域である. この平面は, J' 軸の左右で対称になっている. 実際, この系の分配関数は J の符号反転に対して不変である. その他の細かい性質として, $J = 0$ (J' 軸上) では, このモデルは二つの独立な最近接のみのイジングモデルで表わせる. このモデルの基底状態を表 3.1 にまとめる.

表 3.1: J - J' モデルの基底状態の配置.

	$J < 0$	$J = 0$	$J > 0$
$J' > -\frac{1}{2} J $	AF	F($J' > 0$)	F
$J' = -\frac{1}{2} J $	無限に縮退	-	無限に縮退
$J' < -\frac{1}{2} J $	SAF	AF($J' < 0$)	SAF

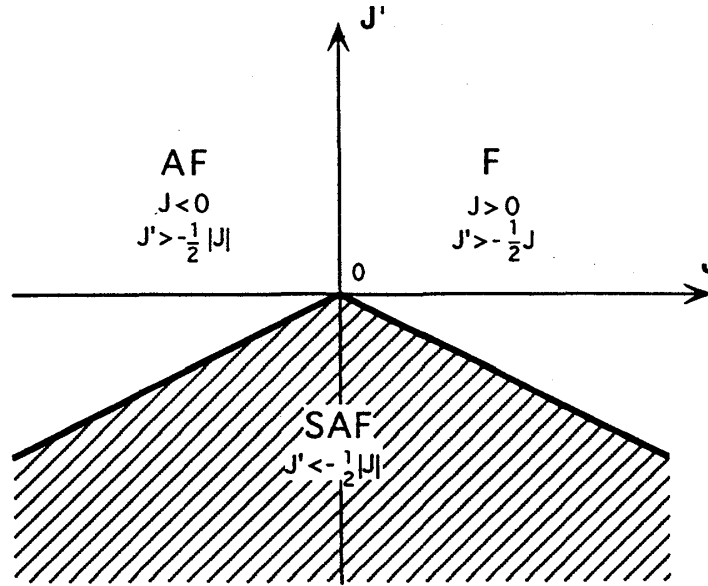
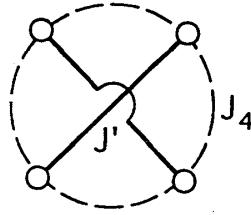


図 3.3: (J, J') 平面で表した J - J' モデルの相図. 斜線部は臨界指数の普遍性が破れている領域を示す.

次近接相互作用 J' と 4 体相互作用 J_4 をもつモデル (J' - J_4 モデル)

最近接相互作用 J がなく次近接相互作用 J' と (最近接の) 4 体相互作用 J_4 が存在するスピン $\frac{1}{2}$ の正方格子イジングモデル (以下 $S = \frac{1}{2}$, J' - J_4 モデルとよぶ) も臨界指数に相互作用依存性がある [16, 17]. このモデルのハミルトニアンは,

$$H = -J' \sum_{\langle ik \rangle} s_i s_k - J_4 \sum_{\langle ijkl \rangle} s_i s_j s_k s_l \quad (3.2)$$

図 3.4: 次近接相互作用 J' と 4 体相互作用 J_4 .

で表わされる. J', J_4 はそれぞれ, 次近接, 4 体相互作用を表わす定数である. 最初の和は次近接格子対についてとり, 二番目の和は単位格子面上の四つのスピンについてとる (図 3.4). このモデルは, 8 バーテックスモデルの特別な場合として表わせる. 8 バーテックスモデルは, バクスター [16, 17] によって厳密に解かれており, 臨界指数にパラメータ依存性があることが示されている. 8 バーテックスモデルの厳密解をいま考えているイジングモデルにあてはめると, 以下のような性質がわかる.

$J_4/|J'| > -1$ の領域

- 二つの相互作用の比 $J_4/|J'|$ の変化とともに臨界指数が連続的に変化する.
- 基底スピン配列は, $J' > 0$ のときが F と AF が縮退している状態で, $J' < 0$ のときは SAF 状態である.

$J_4/|J'| \leq -1$ の領域

- 有限温度で相転移しない ($T_c = 0$).
- 基底状態が無限に縮退している.

基底状態のスピン配置ごとに (J', J_4) 平面を三つの領域にわけて, 図 3.5 に示した. 斜線部は相互作用の変化に対して臨界指数が変化する領域である. このモデルの分配関数は, J' の符号反転に対して不変であり, (J', J_4) 平面は, J_4 軸の左右で対称になっている. $J' = 0$ (J_4 軸上) では基底状態の縮退度が無限大で, $T_c = 0$ である. このモデルの基底状態を表 3.2 にまとめた.

表 3.2: $J'-J_4$ モデルの基底状態の配置.

	$J' < 0$	$J' = 0$	$J' > 0$
$J_4 > - J' $	SAF	無限に縮退	F と AF が縮退
$J_4 \leq - J' $	無限に縮退	無限に縮退	無限に縮退

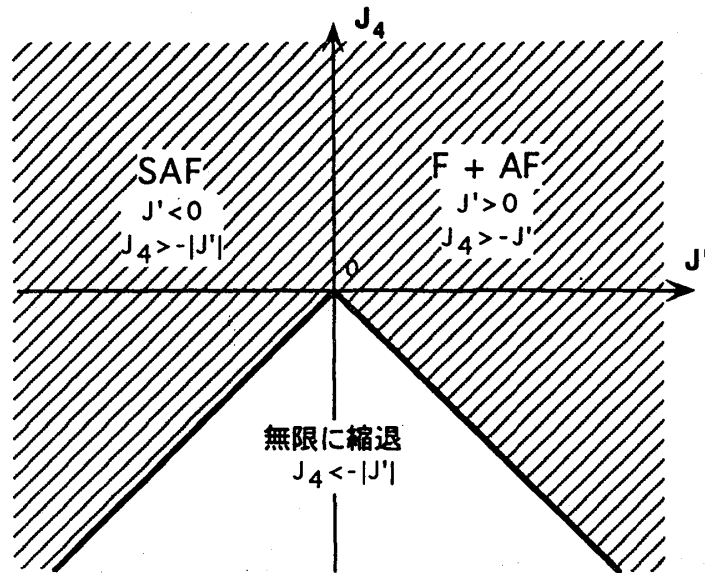


図 3.5: (J', J_4) 平面で表した $J'-J_4$ モデルの相図. 斜線部は臨界指数の普遍性が破れている領域を示す.

秩序パラメータ

以上の二つのモデルで現われた基底状態の配置 F, AF, SAF に対応する秩序パラメータ [1] を定義しておく. そのために, 図 3.6 のように格子を四つの副格子 1, 2, 3, 4 にわけて, 副格子磁化 M_λ を考える:

$$M_\lambda = \sum_{i \in \lambda} s_i, \quad \lambda = 1, 2, 3, 4. \quad (3.3)$$

この表式をもちいると, F と AF の配置の秩序パラメータはそれぞれつぎのように書ける:

$$M_F = M_1 + M_2 + M_3 + M_4 \quad (3.4)$$

$$M_{AF} = M_1 - M_2 + M_3 - M_4. \quad (3.5)$$

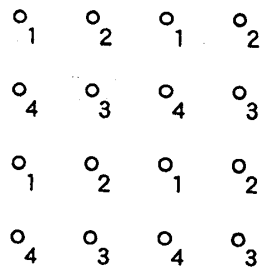


図 3.6: 四つの副格子 1, 2, 3, 4 への分割.

SAF の配置は、おなじ向きのスピンの縦方向に並ぶ場合と横方向に並ぶ場合があるので (図 3.2 参照), 秩序パラメータは二つの成分をもつ:

$$M_{\text{SAF}}^{(1)} = M_1 + M_2 - M_3 - M_4 \quad (3.6)$$

$$M_{\text{SAF}}^{(2)} = M_1 - M_2 - M_3 + M_4. \quad (3.7)$$

また, F と AF が縮退している場合にも, 秩序パラメータは二つの成分 M_F と M_{AF} をもつ.

3.2 モデルの拡張

ここで, 普遍性が破れていた二つのモデルをもとにして臨界指数の値をコントロールするパラメータを拡張し, より一般化したモデルを二つ導入する. そのモデルの臨界指数をしらべることにより, どのような要素が臨界指数を変化させる要因になり得るのかを検証していく.

三つの相互作用をもつモデル (J - J' - J_4 モデル) への拡張

J - J' モデルと J' - J_4 モデルの臨界指数が変化する領域には共通点があることがわかっている. それは, 性質の異なる基底状態が縮退していて秩序パラメータが二つの成分をもつことである [18, 19]. J - J' モデルで普遍性が破れるのは, 基底状態が SAF のときであり, J' - J_4 モデルでは, SAF の場合かあるいは F と AF が縮退している場合であった. このいずれの場合も, 秩序パラメータは二つの成分をもっている.

では, 二つのモデルを一般化して, 相互作用の種類を, 最近接 J , 次近接 J' , および 4 体 J_4 の 3 種類に拡張したモデル (以下 J - J' - J_4 モデルとよぶ) でも, 秩序パラメータが二つの成分をもつ領域で普遍性が破れているのだろうか. このモデルは相互作用の比が限られた領域でしらべられていて, SAF を基底状態にもつ領域で臨界指数が変化することが確認されている [20]. しかし, 相互作用間の競合が比較的大きい領域では臨界指数の値は未知である. 本論文では次章以下で, J - J' - J_4 モデルの臨界指数を広いパラメータ領域で数値計算し, 普遍性が破れているパラメータ領域を確認していく.

スピン1のモデルへの拡張

モデルの拡張には、もう一つの方法がある。それはスピンの大きさ S を変えることである。最近接のみのイジングモデルでは、 $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の場合で臨界指数は変化しないことが確かめられている [21]。では、 J - J' モデルの普遍性が保たれていない領域ではどうだろうか。最近、この疑問が本田ら [22] により提起された。本田ら [22] はこの領域でモンテカルロくりこみ群 (MCRG) の方法を用いて $S = 1$ のときの臨界指数 ν の値を計算し、Swendsen ら [12] がおなじく MCRG 法で計算した $S = \frac{1}{2}$ のときの値と比較した。その結果、本田らは $S = 1$ のときの ν は対応する $S = \frac{1}{2}$ の値よりも小さくなるという結果を得た。具体的には、 $J'/|J| = -1$ のとき、 $S = \frac{1}{2}$ では $\nu = 0.87 \pm 0.015$ であり、 $S = 1$ では $\nu = 0.83 \pm 0.02$ である。しかし、この二つの臨界指数の間の差は、計算精度ぎりぎりの範囲内での結果であり、十分に有意な差があるとはいえない。

次章以下で、 J - J' モデルにおいて本田らが得た結果を、より精度の高い数値計算法で検証していく。さらに、 J' - J_4 モデルや、 J - J' - J_4 モデルでも計算をおこない、臨界指数のスピン依存性の有無をしらべる。

3.3 J - J' - J_4 モデルの基本的な性質

この章の最後に、 J - J' - J_4 モデルの基本的な性質を説明する。このモデルのハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - J' \sum_{\langle ik \rangle} s_i s_k - J_4 \sum_{\langle ijkl \rangle} s_i s_j s_k s_l \quad (3.8)$$

で表わされる。 J, J', J_4 は、順に、最近接、次近接、4体相互作用を表わす定数である。最初の和と二番目の和は、それぞれ、最近接、次近接格子対についてとり、最後の和は、単位格子面上の四つのスピンについてとる。

分配関数 Z は、

$$Z = \sum \exp(-H/k_B T) \quad (3.9)$$

で表わされる。 k_B はボルツマン定数である。和は格子上のすべてのスピン変数のとり得るあらゆる状態についてとる。ハミルトニアンの対称性の考察から、 J', J_4 を固定したまま J の符号を反転しても、 Z は不変であることがわかる。すなわち、

$$Z(J, J', J_4) = Z(-J, J', J_4) \quad (3.10)$$

が成り立っている。系の統計力学的な性質は J の符号によらず、一般性を保ったまま J の符号を任意に選べることがわかる (ただし、系のスピン配置は J の符号によって異なる)。

基底状態

基底状態は、F, AF, SAF と、無限に縮退した状態の 4 通りの可能性があり、相互作用定数 J, J', J_4 の比により、いずれかの状態が選ばれる。この四つの状態について、単位格子面あたりのエネルギーはそれぞれ、

$$\begin{array}{ll} \text{F} & : -2J - 2J' - J_4 \\ \text{AF} & : +2J - 2J' - J_4 \\ \text{SAF} & : +2J' - J_4 \\ \text{無限に縮退} & : +J_4 \end{array}$$

となることがわかる。これらのエネルギーを比較すれば、 J, J', J_4 の値を変化させたときに実現する基底状態が以下のように決まる：

$$\begin{array}{llll} J > 0, & J' < -\frac{1}{2}J, & J' + J_4 > -J & (\text{領域 I}) \text{ のとき} & \text{F} \\ J < 0, & J' < -\frac{1}{2}|J|, & J' + J_4 > -|J| & (\text{領域 II}) \text{ のとき} & \text{AF} \\ & J' > -\frac{1}{2}|J|, & J_4 > J' & (\text{領域 III}) \text{ のとき} & \text{SAF} \\ & & J' + J_4 < -|J|, & J_4 < J' & (\text{領域 IV}) \text{ のとき} & \text{無限に縮退} \end{array}$$

この四つの領域を順に、領域 I, II, III, IV とよぶことにする。この領域を (J, J', J_4) 空間で示すと図 3.7 のようになる。パラメータを二つに減らした $(J'/J, J_4/J)$ 平面では図 3.8 のようになる。ただし、図 3.7 では一般性を失うことなく $J \geq 0$ としてあるので (図 3.8 では $J > 0$)、領域 II は描かれていない。領域 II の統計力学的性質は領域 I と同じである。この (J, J', J_4) 空間の $J_4 = 0$ と $J = 0$ での切り口はそれぞれ図 3.3 の (J, J') 平面と図 3.5 の (J', J_4) 平面に相当する。

領域 I と II の境界面 ($J = 0$) では、F と AF が縮退しており、秩序パラメータは二つの成分をもっていたが、領域 I の内部では、この縮退は消えている (領域 II も同様)。領域 III では、SAF 状態の 4 重縮退は残っている。以下で、これらの領域での臨界指数のふるまいをしらべる。なお、領域 IV は基底状態が無限に縮退しており $T_c = 0$ である。

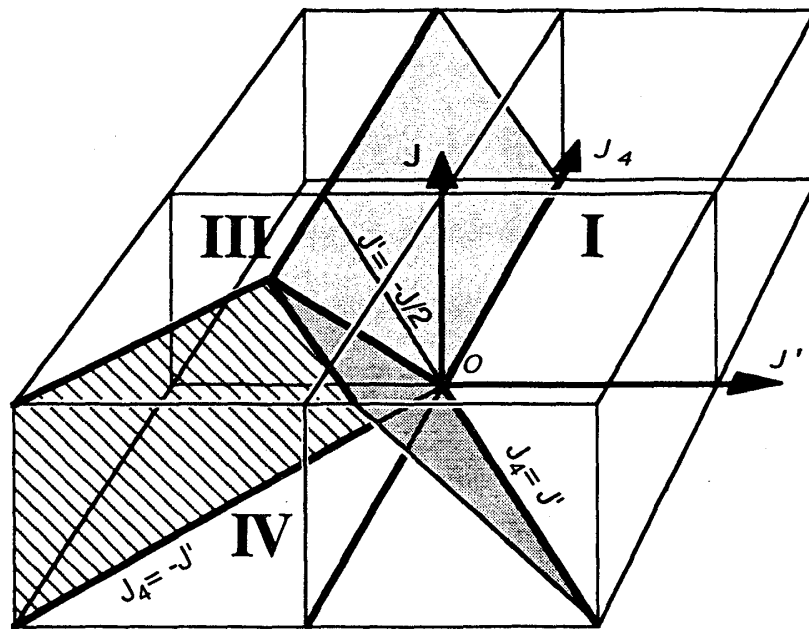


図 3.7: (J, J', J_4) 空間の三つの領域 I, III, IV. 一般性を失わずに $J \geq 0$ としてあるので, 領域 II は描かれていない.

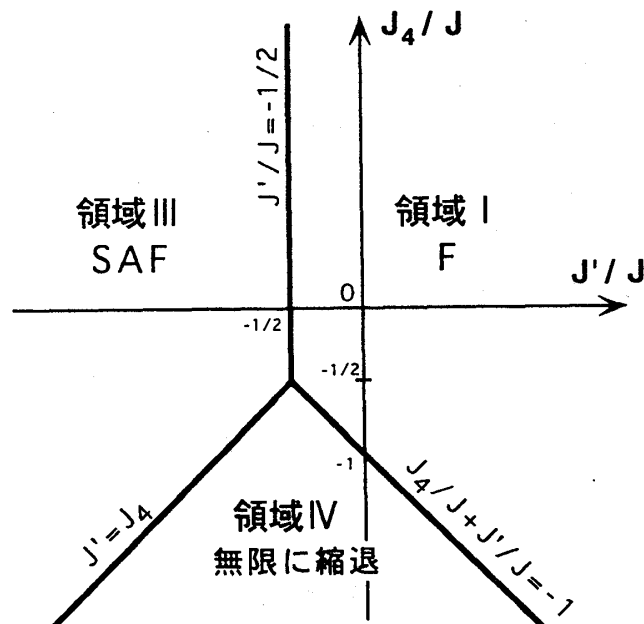


図 3.8: $(J'/J, J_4/J)$ 平面 ($J > 0$) の三つの領域 I, III, IV.

第4章

数値計算方法

この章では、古典2次元格子系の臨界指数を求める方法を説明する。数値計算には、最近、西野と奥西 [26 - 28] により開発された角転送行列くりこみ群 (Corner Transfer Matrix Renormalization Group, CTMRG) の方法もちいる。この方法は、バクスター (Baxter) の角転送行列 (Corner Transfer Matrix, CTM) [17, 29, 30] を密度行列くりこみ群 [31, 32] に導入して2次元古典系の分配関数を求める方法で、従来の密度行列くりこみ群の方法とくらべて少ない計算量で大きな系の分配関数を精度よく求められるという特徴がある。CTMRG のデータから臨界指数求めるためには、有限サイズスケーリング [33, 34] をもちいた解析をおこなう。

CTMRG 法では、数値計算では厳密に扱えない大きな系の物理量を計算するために、まず、小さな格子の分配関数を角転送行列 (CTM) の積の形で厳密に表わす。次に、系のサイズを拡大することを考える。もとの系の CTM から、ひとまわり大きな系の CTM をつくるわけである。この操作をくり返せば系のサイズをつぎつぎと拡大でき、大きな系の分配関数が得られる。しかし実際には、系のサイズを拡大するたびに、CTM の次元もつぎつぎと増加し数値計算の限界を越えてしまう。そこで、くりこみ群の考えをもちいて、分配関数への寄与が大きい状態のみを選んで残りの情報は取り去り、CTM の次元を一定にしたまま系のサイズを拡大する。これが CTMRG 法の概要である。

4.1 CTMRG の方法

ある大きさの古典正方格子系の分配関数を求める方法を考えていく。まず、全系をいくつもの単位格子の集まりとみる。そのうちのある一つの単位格子に注目して、図 4.1 のように

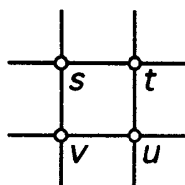


図 4.1: 四つのスピン変数 s, t, u, v に囲まれた単位格子面

四つのスピン変数 s, t, u, v に囲まれた単位格子面 (plaquette) を考える。このとき、この単位格子面に対するエネルギーが、 $E(s, t, u, v)$ で与えられるとする。前章で導入した J - J' - J_4 モデルの場合の $E(s, t, u, v)$ は、

$$E(s, t, u, v) = -\frac{1}{2}J(st + tu + uv + vs) - J'(su + tv) - J_4 stuv \quad (4.1)$$

と書ける。単位格子面のボルツマンウェイトは、

$$W(s, t, u, v) = \exp\left[-\frac{1}{k_B T} E(s, t, u, v)\right] \quad (4.2)$$

で表わされる。このボルツマンウェイトを、格子上のすべての単位格子面についてかけあわせたものが、格子全体に対するボルツマンウェイトになる。

全系の分配関数は、

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle ijkl \rangle} W(s_i, s_j, s_k, s_l) \quad (4.3)$$

となる。ここで、積は格子上のすべての単位格子面についてとり、和は格子上のすべてのスピン変数のとり得るあらゆる状態についてとる。

CTM の定義

今度は、 $2n-1 \times 2n-1$ サイトの正方格子で考える (図 4.2)。簡単のために、系は 90 度回転対称性をもち、また、系の対角線を軸とした反転に対しても対称であるとする (対称性を落とした系にも容易に拡張できる)。格子の外周部のスピン配列は、問題に応じた境界条件により決定する。この格子の中心のスピンを基点に、格子全体を四つの対称な部分に分割する。この各部分を四分面 (quadrant) とよぶ。いま、考えているモデルは 90 度回転対称性をもつので、四つの四分面はどれも同じ構造をしている。

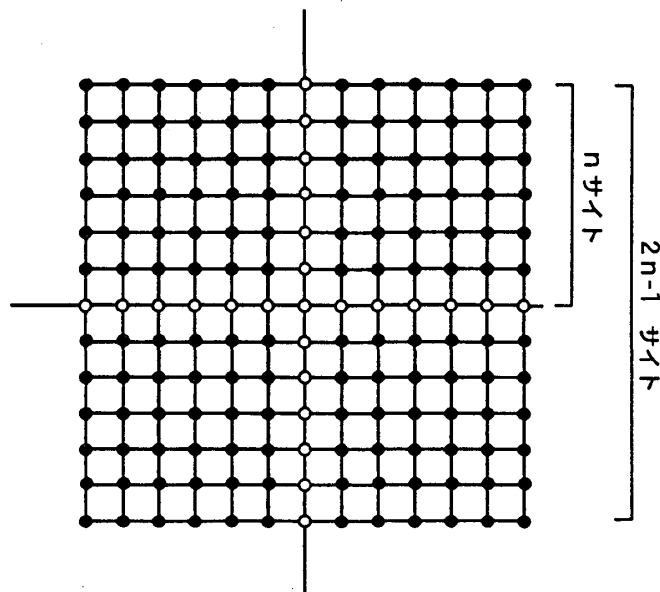


図 4.2: $2n-1 \times 2n-1$ サイトの正方格子. これを四つの対称な部分に分割する.

あるひとつの四分面に注目しよう (図 4.3). この四分面に属するスピンのある配置に対するボルツマンウェイトは,

$$\prod_{\langle ijkl \rangle} W(s_i, s_j, s_k, s_l) \quad (4.4)$$

で表わせる. ただし積は四分面上のすべての単位格子面についてとる. ここで, 図 4.3 の黒まるのスピンのについて和をとって (4.4) を足し合わせると, 切り口のスピンの s_1, s_2, \dots, s_n と s'_1, s'_2, \dots, s'_n (図 4.3 の白まるのスピンの) を固定したときの四分面の分配関数 A_n が与えられる:

$$A_n(s_1 s_2 \dots s_n | s'_1 s'_2 \dots s'_n) = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle ijkl \rangle} W(s_i, s_j, s_k, s_l). \quad (4.5)$$

ただし積は四分面に属するすべての単位格子面についてとり, 和は図 4.3 の黒まるのスピンのについてとる. ここで, スピン変数 s_1, s_2, \dots, s_n と s'_1, s'_2, \dots, s'_n を行列の足とみなそう. 切り口のスピンを固定したときの四分面の分配関数を要素にもつこの行列を, 角転送行列 (Corner Transfer Matrix, CTM) [17, 29, 30] A_n として定義する.

CTM の構造について説明する. 角のスピンの s_1 と s'_1 は共通なので, $s_1 \neq s'_1$ のとき $A_n(s_1 s_2 \dots s_n | s'_1 s'_2 \dots s'_n) = 0$ である. また, 格子の構造から, スピン変数 s_1, s_2, \dots, s_n と

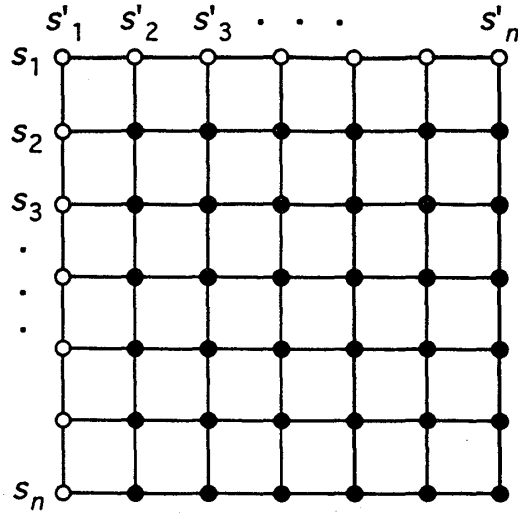


図 4.3: 四分面の黒まるのスピンの和をとったものを CTM として定義する.

s'_1, s'_2, \dots, s'_n の入れ替えに対してボルツマンウェイトは対称なので, $A_n(s_1 s_2 \dots s_n | s'_1 s'_2 \dots s'_n) = A_n(s'_1 s'_2 \dots s'_n | s_1 s_2 \dots s_n)$ が成り立っている. すなわち, A_n はスピン変数 s_1 と s'_1 についてブロック対角な実対称行列である. 行列の大きさは, $S = \frac{1}{2}$ イジングモデル (2 状態) のときは $2^n \times 2^n$ であり, $S = 1$ (3 状態) のときは $3^n \times 3^n$ になる. 以後, 簡単のためにこの章では, 2 状態のモデルについて考えることにする.

CTM は縦のスピン列の状態 s_1, s_2, \dots, s_n を横のスピン状態 s'_1, s'_2, \dots, s'_n に転送する作用素とみなすこともできる (図 4.3). CTM が四分面の分配関数であったことを思い出すと, 格子全体の分配関数は, CTM をもちいて (スピン列を 4 回転送してトレースをとり),

$$Z = \text{Tr } A_n^4 \quad (4.6)$$

と表わせる.

CTM の拡大

つぎに, これまでの系の大きさ ($2n-1 \times 2n-1$ サイト) を 1 サイトずつ拡大して, $2n+1 \times 2n+1$ サイトの格子を扱う方法を考えよう. つまり, A_n をもちいて A_{n+1} を組み立てるわけである. そのためには, 単位格子面を必要な数だけ A_n につけたす操作をすればいい. 図 4.4 に, その構成法を図示してある. この CTM A_{n+1} と A_n の関係を行列要素で表わすと,

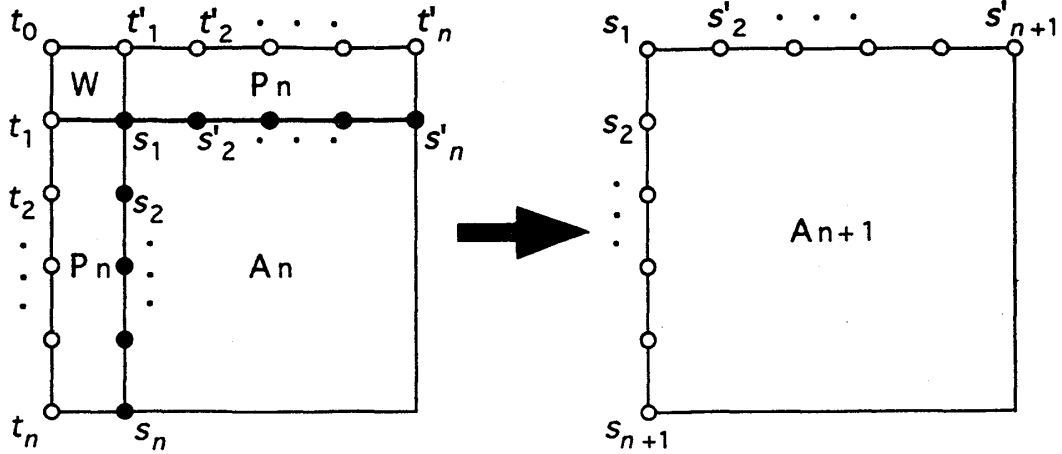


図 4.4: CTM を拡大する方法. 2^n 次元行列 A_n から, 2^{n+1} 次元行列 A_{n+1} を構成する. 黒まるのスピンは和をとることを示す.

$$\begin{aligned}
 & A_{n+1}(t_0 t_1 t_2 \dots t_n | t'_0 t'_1 t'_2 \dots t'_n) \\
 &= \sum_{\substack{s_1, s_2, \dots, s_n \\ s'_2, \dots, s'_{n+1}}} W(t_0, t_1, s_1, t'_1) P_n(t_1 t_2 \dots t_n | s_1 s_2 \dots s_n) \\
 &\quad \times A_n(s_1 s_2 \dots s_n | s'_1 s'_2 \dots s'_n) P_n(s'_1 s'_2 \dots s'_n | t'_1 t'_2 \dots t'_n) \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

と書ける. ここで, P_n は列から列への (row-to-row) 転送行列である:

$$\begin{aligned}
 & P_n(s_1 s_2 \dots s_n | t_1 t_2 \dots t_n) \\
 &= W(s_1, s_2, t_2, t_1) W(s_2, s_3, t_3, t_2) \dots W(s_{n-1}, s_n, t_n, t_{n-1}) \\
 &= W(s_1, s_2, t_2, t_1) P_{n-1}(s_2 s_3 \dots s_n | t_2 t_3 \dots t_n). \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

この (4.8) から, 行列 P_n も, 長さが 1 サイト分短い P_{n-1} に単位格子面を一つ継ぎ足して構成できることがわかる.

このようにして, 2^n 次元行列 A_n から, 2^{n+1} 次元行列 A_{n+1} を構成できた. CTM A_{n+1} のインデックスを $t_0, t_1, \dots, t_n \rightarrow s_1, s_2, \dots, s_{n+1}$ とおきかえて (4.7), (4.8) を繰り返し適用して, 系の大きさをつぎつぎと拡大できる. CTM の初期値として $n=2$ の四分面から出発すれば, 任意の大きさの CTM を構成できる.

ここで、行列要素の表記を簡略な形に書きなおしておく：

$$A_n(s_1 s_2 \dots s_n | s_1' s_2' \dots s_n') \longrightarrow A_n(s_1 S | s_1' S').$$

上記のように、CTM A_n の s_2 から s_n までのスピン変数を、一つのブロックスピン変数 S で代表させる。 S は、1 から m までの m 状態をとる。ここでは、 m の値は、 s_2 から s_n までの $n-1$ 個のスピンのとりうる状態数 $m = 2^{n-1}$ に等しい。系の大きさを表わす指標 n は、複雑な場合は適宜省略する。

この表式をもちいると、 $4m$ 次元行列 A_{n+1} と P_{n+1} は、 $2m$ 次元行列 A_n と P_n をもちいて、

$$A_{n+1}(t_0 t_1 T | t_0' t_1' T') = \sum_{s_1, S, S'} W(t_0, t_1, s_1, t_1') P_n(t_1 T | s_1 S) A_n(s_1 S | s_1' S') P_n(s_1' S' | t_1' T') \quad (4.9)$$

$$P_{n+1}(s_0 s_1 S | t_0 t_1 T) = W(s_0, s_1, t_1, t_0) P_n(s_1 S | t_1 T) \quad (4.10)$$

と書き表せる。ただし、大文字の変数 S, S', T, T' はブロックスピン変数を表わす。

くりこみ操作

A_n は 2^n 次元行列であり、行列の次元が n とともに急速に拡大するので、そのまま数値計算で扱うことはできない。したがって、何らかの方法により — ここではくりこみ群をもちいる — 行列の次元をおさえる工夫が必要になる。CTM を一度拡大すると、 A と P の行列の次元は2倍に増える。増えた自由度を減らし、行列をもとの大きさにもどせれば、計算量の問題は解決する。したがって、二つの $4m$ 次元行列、

$$A(s_1 s_2 S | s_1' s_2' S') \quad , \quad P(s_1 s_2 S | s_1' s_2' S')$$

のスピン自由度をくりこんで、それぞれ、

$$\tilde{A}(s_1 S^{\text{new}} | s_1' S'^{\text{new}}) \quad , \quad \tilde{P}(s_1 S^{\text{new}} | s_1' S'^{\text{new}})$$

と、 $2m$ 次元行列の形に還元することがわれわれの目的である。

そこで、CTMRG 法では、CTM により転送されるスピン状態のベクトル空間を考え、この空間において、全系の分配関数に小さい寄与しかもたらさないスピン配列をふるい落とすことで、スピン自由度の増加をおさえるという方法をもちいる。つまり、 A を対角化し

て固有値を求め、その固有値のなかで絶対値が相対的に小さいものに対応する (irrelevant な) 自由度をとり去るわけである。

A はブロック対角な $4m$ 次元行列、

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A^\uparrow & 0 \\ \hline 0 & A^\downarrow \end{array} \right)$$

であり、二つの $2m \times 2m$ 行列 A^\uparrow と A^\downarrow にわけられる。この二つの行列は、角のスピンを、それぞれ、上向きと下向きに固定したときの CTM である：

$$A^\uparrow(s_2 S | s'_2 S') = A(+1 s_2 S | +1 s'_2 S') \quad (4.11)$$

$$A^\downarrow(s_2 S | s'_2 S') = A(-1 s_2 S | -1 s'_2 S'). \quad (4.12)$$

A と同様に、 A^\uparrow, A^\downarrow も実対称行列である。

A はブロック対角なので、分配関数は A^\uparrow と A^\downarrow の 4 乗のトレースの和で書ける：

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} A^4 \\ &= \text{Tr} A^{\uparrow 4} + \text{Tr} A^{\downarrow 4} \end{aligned} \quad (4.13)$$

この (4.13) でわかるように、分配関数への寄与は、 A^\uparrow と A^\downarrow にわかれる。行列 A^\uparrow と A^\downarrow はおなじ表式をしているので、以後、 A^\uparrow をもちいて話をすすめる (A^\downarrow についても同様である)。

A^\uparrow によって転送されるスピン状態のベクトル空間を考える。スピン変数 s_2, S のとりうる $2m$ 個の状態が、この空間の正規直交基底になっている。 A^\uparrow を対角化しよう：

$$R^{\uparrow T} A^\uparrow R^\uparrow = D^\uparrow, \quad R^{\uparrow T} = \hat{R}^{\uparrow -1} \quad (4.14)$$

D^\uparrow は A^\uparrow を対角化した行列であり、固有値は絶対値の大きい順に並んでいるとする。 R^\uparrow は A^\uparrow を対角化する直交行列で、固有値に対応する固有ベクトルが順に並んでいる。

さて、分配関数への A^\uparrow による寄与 Z^\uparrow は、 A^\uparrow の 4 乗のトレースで表わせる：

$$Z^\uparrow = \text{Tr} A^{\uparrow 4} = \text{Tr} (R^{\uparrow T} A^\uparrow R^\uparrow)^4 = \text{Tr} D^{\uparrow 4} \quad (4.15)$$

結局、 $2m$ 個の固有値の 4 乗の和が分配関数に寄与する。絶対値が相対的に小さい (irrelevant な) 固有値からの寄与は、 Z^\uparrow にくらべて非常に小さい。したがって、固有値が $2m$ 個並ん

対角行列 D^\dagger の代わりに、絶対値の大きい方から固有値を m 個だけ並べた対角行列 \tilde{A}^\dagger をもちいて Z^\dagger を精度良く近似できる：

$$\begin{aligned} Z^\dagger &= \text{Tr} A^{\dagger 4} = \text{Tr} D^{\dagger 4} \\ &\approx \text{Tr} \tilde{A}^{\dagger 4}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

この m 次元対角行列 \tilde{A}^\dagger を新しい CTM として採用する。このように、くりこみ群の考えにより、分配関数への寄与が小さい (irrelevant な) 自由度を取り去り CTM の行列次元を減らすことが、CTMRG の特徴である。

くりこむ前の $2m$ 次元行列 A^\dagger と、くりこみ後の m 次元行列 \tilde{A}^\dagger の間には、どのような変換が存在するかを考えよう。 A^\dagger を直交行列 R^\dagger で対角化すると、固有値が $2m$ 個並んだ D^\dagger に変換された。 A^\dagger から \tilde{A}^\dagger を得たい場合には、固有値を絶対値が大きい順に m 個だけ残せばいい。つまり、 A^\dagger を対角化するさい、 $2m \times 2m$ の直交行列 R^\dagger をもちいる代わりに、固有ベクトルを m 個だけ並べた $2m \times m$ 行列 \tilde{R}^\dagger で射影変換するのである：

$$A^\dagger \rightarrow R^{\dagger T} A^\dagger R^\dagger = D^\dagger \quad (4.17)$$

$$A^\dagger \rightarrow \tilde{R}^{\dagger T} A^\dagger \tilde{R}^\dagger = \tilde{A}^\dagger. \quad (4.18)$$

この (4.18) が A^\dagger と \tilde{A}^\dagger の関係式である。

もう一方の CTM A^\dagger についても、まったくおなじ手順で \tilde{A}^\dagger をつくりだせる。 $\tilde{A}^\dagger, \tilde{A}^\dagger$ を行列要素で表わすと、

$$\tilde{A}^\dagger(S^{\text{new}}|S'^{\text{new}}) = \sum_{s_2, S, s'_2 S'} \tilde{R}^{\dagger T}(S^{\text{new}}|s_2 S) A^\dagger(s_2 S|s'_2 S') \tilde{R}^\dagger(s'_2 S'|S'^{\text{new}}) \quad (4.19)$$

$$\tilde{A}^\dagger(S^{\text{new}}|S'^{\text{new}}) = \sum_{s_2, S, s'_2 S'} \tilde{R}^{\dagger T}(S^{\text{new}}|s_2 S) A^\dagger(s_2 S|s'_2 S') \tilde{R}^\dagger(s'_2 S'|S'^{\text{new}}) \quad (4.20)$$

となる。この二つの CTM を合わせると、角のスピン自由度も含めた形で、くりこまれた CTM \tilde{A} を構成できる：

$$\tilde{A}(s_1 S^{\text{new}}|s_1 S'^{\text{new}}) = \delta_{s_1, +1} \tilde{A}^\dagger(S^{\text{new}}|S'^{\text{new}}) + \delta_{s_1, -1} \tilde{A}^\dagger(S^{\text{new}}|S'^{\text{new}}). \quad (4.21)$$

同様に、射影変換行列 \tilde{R}^\dagger と \tilde{R}^\dagger を合わせた行列

$$\tilde{R}(s_1 s_2 S|s_1 S^{\text{new}}) = \delta_{s_1, +1} \tilde{R}^\dagger(s_2 S|S^{\text{new}}) + \delta_{s_1, -1} \tilde{R}^\dagger(s_2 S|S^{\text{new}}) \quad (4.22)$$

がつくれる。 $\tilde{R}(s_1 s_2 S | s_1 S^{\text{new}})$ は、角のスピンも含む CTM をくりこみ変換する行列である。最終的に、 $4m$ 次元行列 A とくりこまれた $2m$ 次元行列 \tilde{A} の関係は、(4.19) と (4.20) を合わせた表式で、

$$\tilde{A}(s_1 S^{\text{new}} | s_1 S^{\text{new}}) = \sum_{s_2, S, s_2' S'} \tilde{R}^T(s_1 S^{\text{new}} | s_1 s_2 S) A(s_1 s_2 S | s_1 s_2' S') \tilde{R}(s_1 s_2' S' | s_1 S^{\text{new}}) \quad (4.23)$$

となる。

以上では、行列 A に対するくりこみをおこなった。つぎに、行列 P について考えよう。図 4.4 をみてわかるように、 A と P は同じスピン配列を共有している。したがって、 P も A と同様なくりこみ操作を受けなければならない。行列 P により転送されるスピンも \tilde{A} とおなじ表示にうつすために、射影行列 \tilde{R} をもちいて P を \tilde{P} に変換すれば、

$$\tilde{P}(s_1 S^{\text{new}} | s_1' S^{\text{new}}) = \sum_{s_2, S, s_2' S'} \tilde{R}^T(s_1 S^{\text{new}} | s_1 s_2 S) P(s_1 s_2 S | s_1' s_2' S') \tilde{R}(s_1' s_2' S' | s_1' S^{\text{new}}) \quad (4.24)$$

となり、 P についてのくりこみも設定できる。これですべてのくりこみ操作が完了した。

以上でみてきたように、行列の拡大 (4.9), (4.10) とくりこみ (4.23), (4.24) の過程を交互にくり返せば、(実行可能な) 一定の計算量で系の大きさを拡大でき、熱力学的極限での物理量を十分に推定可能なサイズまで到達できる。このくり返しの手順を図形で表わすと図 4.5 のようになる。なお、数値計算をするさい、系の拡大とともに A や P の行列要素の絶対値の最大値が増えつづけてしまうという問題が生じるが、その場合は、適当な因子 (例えば絶対値最大の行列要素) で行列を規格化すればいい。

最後に CTMRG の手順をまとめて以下に示す：

- (1) 境界条件に応じて、初期行列 A_2 と P_2 を与える。
- (2) (4.9), (4.10) により行列 A_n と P_n の大きさを拡大する。行列 A_n と P_n の次元が、くりこむ行列の次元 $2m$ より大きくなるまで、この操作をくり返す。
- (3) A_n の次元が $2m$ を越えたら、 A_n を二つの行列 A_n^{\uparrow} と A_n^{\downarrow} にわけ、それぞれ対角化して固有値、固有ベクトルを求める (式 (4.14))。
- (4) 絶対値の大きい方からそれぞれ m 個、あわせて $2m$ 個の固有値と対応する固有ベクトルをもちいて、 A_n と P_n をそれぞれ \tilde{A}_n と \tilde{P}_n にくりこむ (式 (4.23) と (4.24))。

(5) \tilde{A}_n と \tilde{P}_n を新しい A_n と P_n とみなす.

(6) 大きさ N の系の分配関数 Z_N を求めたいならば, $n = \frac{N+1}{2}$ となるまで, 手順(2) から手順(5) をくり返し, $Z_N = (A_{\frac{N+1}{2}})^4$ を計算する.

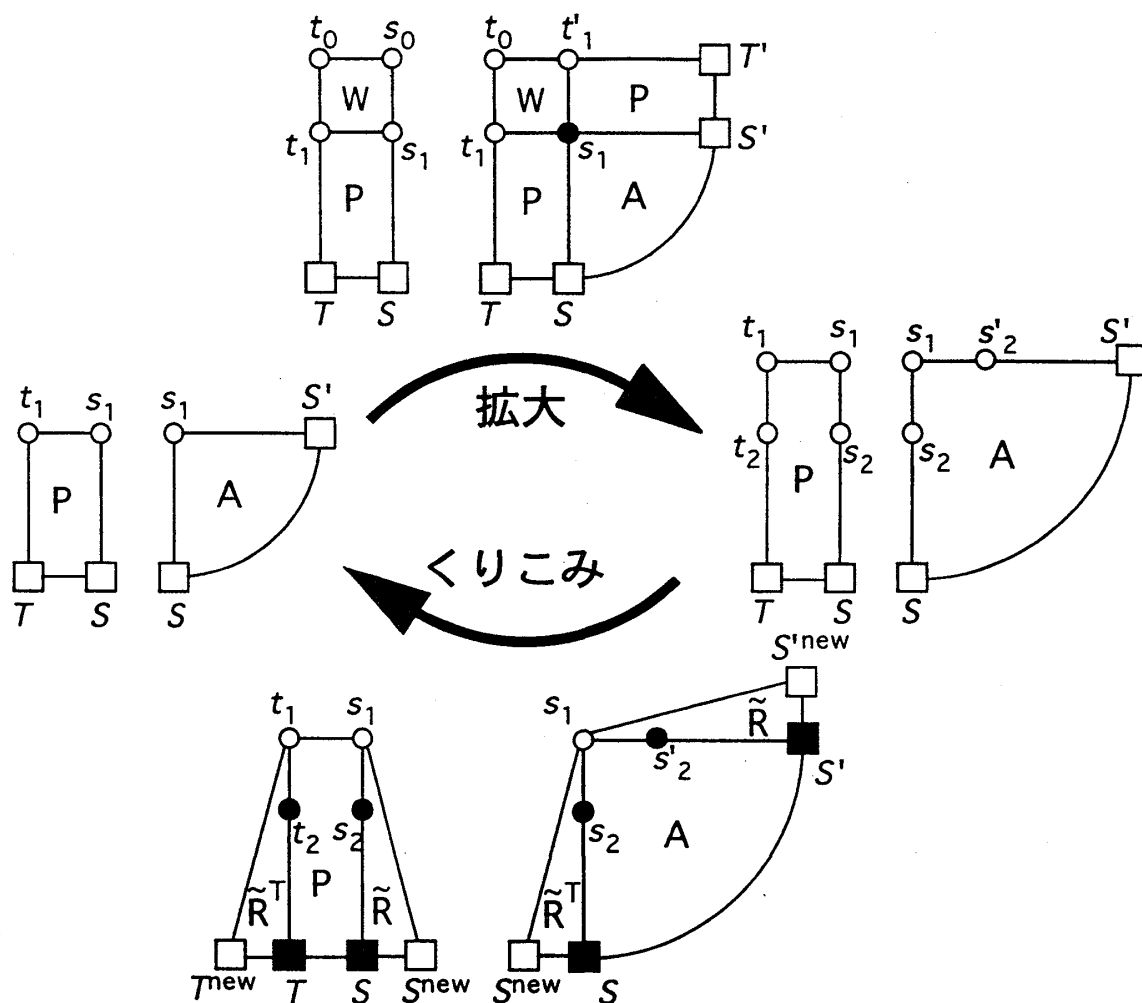


図 4.5: CTM の拡大とくりこみを交互にくり返す手順. 四角のスピンはブロックスピンを表わす. 黒いスピンは和をとることを示す.

4.2 物理量の計算方法

CTMRG 法では分配関数 Z が計算できるので、数値微分をもちいて、任意の物理量の期待値を求められる。あるいは、数値微分をしないで計算できる量もある。拡大したあとの CTM には角のスピンの状態とその隣のスピンの状態の情報が独立に残っているので、これらのスピンに関する物理量は直接もとめられる。

たとえば、磁化は、系の中心のスピンの期待値をもちいて、

$$m = \langle s_1 \rangle = \frac{\text{Tr } S_1 A^4}{\text{Tr } A^4} \quad (4.25)$$

と表せる。ここで、 $S_1(s_1 s_2 S | s'_1 s'_2 S') = \delta_{s_1, s'_1} s_1$ である。自発磁化を得るには、系の基底状態に応じた境界条件を設定すればいい。たとえば、強磁性相の場合は境界のスピンをすべて同じ方向に固定する。もっと一般的な境界条件を設定するときは CTM の組み立て方法に修正が必要であるが、詳解は省く。

隣接するスピンの相関関数も同様にして計算できる：

$$\langle s_1 s_2 \rangle = \frac{\text{Tr } S_1 S_2 A^4}{\text{Tr } A^4} \quad (4.26)$$

また、これまでの CTMRG の計算は、(奇数)×(奇数)の格子を扱ってきたが、(偶数)×(偶数)の格子を組み立てて、4点相関関数なども求められる。詳しい説明は省略するが、図 4.6 に示すように、物理量を計算するさいに、CTM A に P を一列だけ張り付けてできる部品を利用して全格子を構成すればいい。

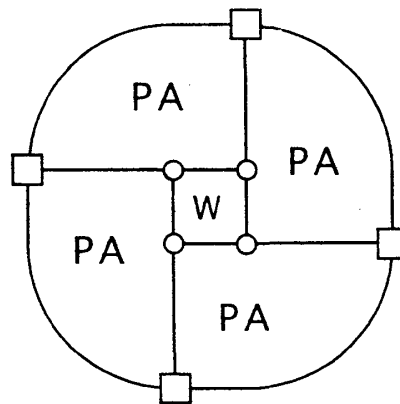


図 4.6: (偶数)×(偶数)の格子の構成方法

4.3 有限サイズスケーリングによる臨界指数の評価

CTMRG で計算した物理量から臨界指数を求めるために、2 章で解説した有限サイズスケーリング [33, 34] をもちいる。相転移は、格子が無限に大きくスピンの数が無限大でなくては起こらない。しかし、数値計算で熱力学的極限を扱うことはできない。有限系のデータから熱力学的極限の性質を得るためにはなんらかの外挿が必要となる。この外挿を理論的に与えるのが、有限サイズスケーリングである。

2 章で導いた結果 (2.36) をもう一度書くと、

$$E(0, 0, N) \sim N^{\frac{1}{\nu}-d} \quad (4.27)$$

であった。この式は、臨界温度での有限系の物理量が、系のサイズ N の臨界指数で指定されるべき関数で書けるということである。

式 (4.27) を利用すれば、臨界点上で N を変化させてエネルギー $E(N)$ を求めることにより — つまり CTMRG で系の大きさ N を拡大するたびに物理量を計算することで — 臨界指数 ν の値を決められる。実際には臨界温度 T_c があらかじめ分からないことが多いので、温度 T を変化させて物理量を計算し、(4.27) にもっともよくフィットする T_c と臨界指数の値を求める。

精度の確認

この解析方法の精度を確認するために、まず、厳密解がある場合で試行計算してみる。 T_c は既知として厳密な値をもちい、そのときの臨界指数を評価する。

最近接相互作用のみの $S = \frac{1}{2}$ イジングモデルでは、厳密な臨界指数の値は、 $\nu = 1$ である。有限サイズスケーリング (4.27) によると、 $E(N) \sim N^{-1}$ となる。厳密な $T_c = 2.269185314$ をもちいて、 $E(N)$ を N^{-1} に対してプロットすると、図 4.7 のようになる。図 4.7 では CTMRG においてくりこまれた後の行列の大きさ m をいくつか変えて表示してある。 $m = 64$ のデータはよく直線に乗っており、有限サイズスケーリングの予測と一致していることがわかる。一方、 m が小さい場合は、系の拡大をくり返していくと、すぐに直線からはずれてしまい、一定の値に収束してしまう。これは、増え続けるスピン自由度を有限の値 m にくりこんだことに起因する。つまり、系のサイズが大きくなり臨界現象にかかわるスピンの数が増えると、有限の m では臨界現象を十分に表わせなくなるのである。したがって、臨界

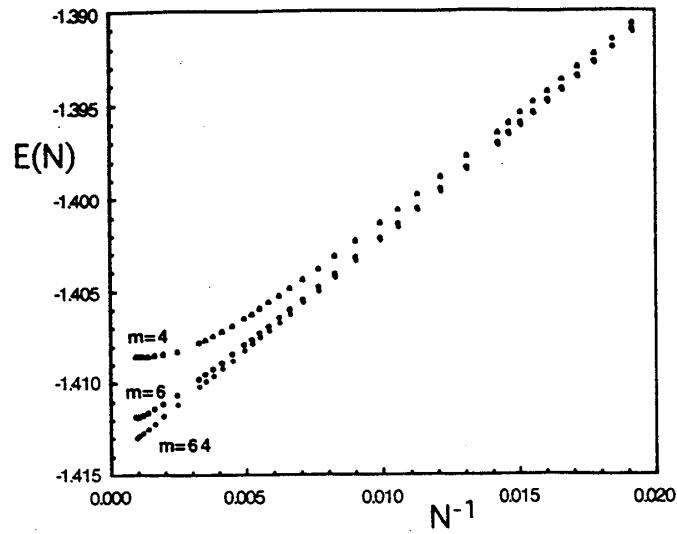


図 4.7: 臨界点で計算した $S = \frac{1}{2}$ 最近接イジングモデルの単位格子面あたりのエネルギー $E(N)$ の N 依存性. m の大きさを変えて表示してある.

指数を精度よく求めるためには, 十分に直線に乗っている N の範囲を選んで, m の大きさをできるだけ大きくとり, 見積もった臨界指数の値に m 依存性がなくなってはじめて, その値を採用する.

最近接モデルの厳密な T_c の上で m をいくつか変えて CTMRG でデータを取得し (4.27) にあてはめ, 最小二乗法をもちいて臨界指数 ν と, 無限系のエネルギー $E(\infty)$ を求めたものを, 表 4.1 にまとめた. 系の大きさ N は, 各 m ごとに直線性のいい範囲を選んで解析にもちいた.

表 4.1: $S = \frac{1}{2}$ 最近接イジングモデルで求めた臨界指数 ν と臨界点でのエネルギー E_c . N は解析にもちいた系のサイズを示す.

m	N	ν	E_c
8	50-200	1.0240	-1.413934
16	200-500	1.0071	-1.414158
32	200-500	1.0044	-1.414186
64	200-500	1.0040	-1.414190
128	200-500	1.0040	-1.414190
exact		1	$-\sqrt{2}$

行列の大きさ m を増やすと臨界指数 ν は一定の値に収束した。厳密な値と比較すると誤差は $\nu = 1.00 \pm 0.005(0.5\%)$ 以内に収まっている。

同様にして、厳密解が分かっている $J'-J_4$ モデルに対しても、臨界指数の普遍性が破れている領域も含めて臨界指数を評価してみる (表 4.2)。

表 4.2: $J'-J_4$ モデルで求めた臨界指数 ν 。

m	$J' = 1, J_4 = 0$ $T_c/J' = 2.269185314$		$J' = 1, J_4 = 1$ $T_c/J' = 3.640957$	
	N	ν	N	ν
32	100-400	1.0841	100-400	0.79173
64	100-400	1.0116	100-400	0.75217
128	100-400	1.0019	100-400	0.74728
180	100-400	1.0011	100-400	0.74681
外挿		1.0009		0.74655
exact		1		0.75000

最近接のみの場合に比べると臨界指数の収束は遅くなっていて、 $m = 180$ まで計算しても一定値には収束しなかった。しかし、 $m = 32, 64, 128, 180$ に対して求めた臨界指数 ν を $m \rightarrow \infty$ に外挿した値をもちいれば厳密解と比較して誤差 0.5% 以内におさまっている。本論文の計算では、 $m = 180$ まで計算しても ν が一定の値に収束しない場合は、 $m = 180$ までで求めた値を外挿して ν を評価することにする。

つぎに、 $S = 1$ の場合も計算精度の確認をおこなう。 $S = 1$ イジングモデルの厳密解はないが、最近接相互作用のみのときの臨界指数は $S = \frac{1}{2}$ の値と一致することが確認されている [21]。また $T_c = 1.6935$ が知られている [21]。この系で臨界指数を評価すると表 4.3 のようになった。

この場合も、行列の大きさ m を増やすと ν はそれぞれ一定の値に収束した。得られた ν の値はきわめて 1 に近く、最近接モデルでは普遍性が保たれているという結果 [21] にあう。この結果から、 $S = 1$ のモデルに対しても $S = \frac{1}{2}$ のときとおなじく臨界指数を十分な精度で計算できているといえる。

表 4.3: $S = 1$ の最近接イジングモデルで求めた臨界指数 ν . $T_c = 1.6935$ をもちいた.

m	N	ν
27	100-400	1.0020
81	100-400	1.0013
129	100-400	1.0013
180	100-400	1.0013

これまでの計算は, T_c が分かっていることを前提にしてきたが, 本論文で臨界指数を求めたい領域は一般に T_c が知られていない. 以下で, T_c が得られていない場合を仮定して臨界指数を評価してみる.

厳密な T_c がわかっているモデル ($S = \frac{1}{2}, J = 0, J' = 1, J_4 = 0, T_c = 2.2691853$) で, 温度 T を T_c から 0.00005 (約 0.002%) 刻みでずらして (4.27) とのフィッティングをおこない有限サイズスケールリングとのずれを調べた (表 4.4). フィッティング誤差は $m = 180$ のときに計算したものをもちいた. ν は $m = 32, 64, 128, 180$ で計算した値を $m \rightarrow \infty$ に外挿した値である.

表 4.4: 温度 T を, 厳密な $T_c = 2.2691853$ から 0.00005 刻みでずらして, 有限サイズスケールリングにより ν を求めた. 系のサイズ $100 \leq N \leq 400$ のデータをもちいた. χ^2 はフィッティングの誤差を表す.

T	$T - T_c$	ν	χ^2
2.2689853	-0.00020	0.98929	2.7655e-11
2.2690353	-0.00015	0.99221	7.9825e-12
2.2690853	-0.00010	0.99502	2.2749e-13
2.2691353	-0.00005	0.99790	5.4217e-12
2.2691853	0	1.0009	2.2629e-11

もっともよくフィットするのは $T = T_c$ のときではなく $T = T_c - 0.0001$ のときとなった. この温度で臨界指数を見積もると $\nu = 0.99502$ となり厳密な値 $\nu = 1$ と誤差 0.5% で一致している. しかし, 真の T_c で計算した値 $\nu = 1.0009$ と比べると 0.6% 程度くいちがう. T_c のずれによる臨界指数の誤差 (0.6% 程度) と臨界指数の計算精度自体の誤差 (0.5% 程度) をあわせると, 1% 程度の誤差が存在し得ることがわかる.

以上の考察より，くりこみ行列の大きさを最大 $m = 180$ までで計算すれば，臨界指数 ν を 1 % 程度の精度で計算できることが確認できた。

第 5 章

計算結果

この章で， J - J' - J_4 モデルの臨界指数を計算し，相互作用とスピンの大きさ S に対する臨界指数の依存性をしらべる．まず， $S = \frac{1}{2}$ の場合で相互作用の比を変化させて臨界指数 ν を求め， ν に相互作用依存性のある領域を確認していく．とくに，これまでしらべられていなかった相互作用間の競合が強い範囲も含めて ν を計算する．つぎに，臨界指数が相互作用に依存する領域において， $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の場合で ν を計算し， ν の S 依存性の有無をしらべる．

5.1 $S = \frac{1}{2}$ J - J' - J_4 モデルの臨界指数

第 3 章で基底状態により分割した領域ごとに結果を示す．ただし，一般性を失うことなく $J \geq 0$ としたので，領域 II はあつかわずに領域 I で代表させる．また，領域 IV は有限温度で相転移を起こさないので解析はおこなわない．

領域 I

まず，強磁性の基底状態をもつ領域 I で相互作用のパラメータを変えて臨界指数 ν を計算した．領域内の三つの点 $(J'/J, J_4/J) = (-0.2, -0.2), (1, -1), (-0.2, 1)$ で，それぞれ温度を変えて求めた臨界指数 ν を表 5.1 に示す．臨界指数 ν の値は， $m = 64, 128, 180$ の結果を $m \rightarrow \infty$ に外挿して評価した．系の大きさは有限サイズスケーリング則が良く成立する範囲 $100 \leq N \leq 400$ をもちいた．有限サイズスケーリングとのフィッティング誤差は $m = 180$ で計算したときのものである．

表 5.1: 温度を変えて、領域 I 内の 3 点で計算した ν の値. χ^2 は有限サイズスケーリングとのフィッティング誤差を示す. χ^2 が最小になる温度を T_c として採用し、そのときの ν の値をもって臨界指数を決定する.

$\frac{J'}{J} = -0.2, \frac{J_4}{J} = -0.2$			$\frac{J'}{J} = -0.2, \frac{J_4}{J} = 1$			$\frac{J'}{J} = 1, \frac{J_4}{J} = -1$		
T/J	ν	χ^2	T/J	ν	χ^2	T/J	ν	χ^2
1.38010	1.0021	1.0371e-10	2.55965	0.98965	3.4774e-11	3.86510	0.99730	7.1581e-11
1.38015	1.0087	1.6337e-14	2.55970	0.99490	2.9018e-12	3.86515	0.99917	2.9570e-12
1.38020	1.0156	4.9426e-11	2.55975	1.0069	2.0891e-11	3.86520	1.0011	1.3664e-11

温度を変えてフィッティング誤差をくらべると、ある温度で誤差が最小になる. この温度を、 T_c として採用し、そのときの ν の値をもって臨界指数を決定する. 4 章での考察より、 T_c と ν の誤差はそれぞれ ± 0.0001 , ± 0.01 程度だと思われる.

得られた ν の値は順に、1.0087, 0.99490, 0.99917 となった. この値はすべて、最近接のみの値 $\nu = 1$ に計算誤差の範囲内で一致している.

つぎに、最近接相互作用 $J > 0$ が非常に小さい場合 ($J'/J = 100$, $J_4/J = 100$) の計算結果をみてみよう. 臨界点上で系のサイズを変えてエネルギーを計算し有限サイズスケーリング則との適合をしらべた. $E(N)$ を N^{-1} に対してプロットすると図 5.1 のようになる. N が小さい範囲 (図右上) では、直線に乗らず $\nu = 1$ の予測する振る舞いからはずれている. しかし、 N が大きくなり (左下) 臨界現象に関与するスピンの数が大きくなると直線に乗っていて、最近接のみの場合 ($\nu = 1$) での有限サイズスケーリングの予測と一致している.

領域 III

つぎに、SAF の配置を基底状態にもつ領域 III での計算結果を示す. この領域では二つのパラメータ $J'/|J|$, $J_4/|J|$ の変化とともに臨界指数が連続的に変わることを確認した. とくに、これまでしらべられていなかった相互作用間の競合が強い範囲 ($-1 < J'/|J| < -\frac{1}{2}$) での臨界指数 ν の値を計算した.

二つのパラメータ $J'/|J|$, $J_4/|J|$ に対する ν の変化をみるために、 ν の値を (J_4/J , J'/J) 平面上に書きこんで図 5.2 に示した. 黒い点のそばの数値がその点における ν の値である. 計算精度は $\pm 1\%$ 程度である. 領域内全般にわたって ν の値が変化していることがわか

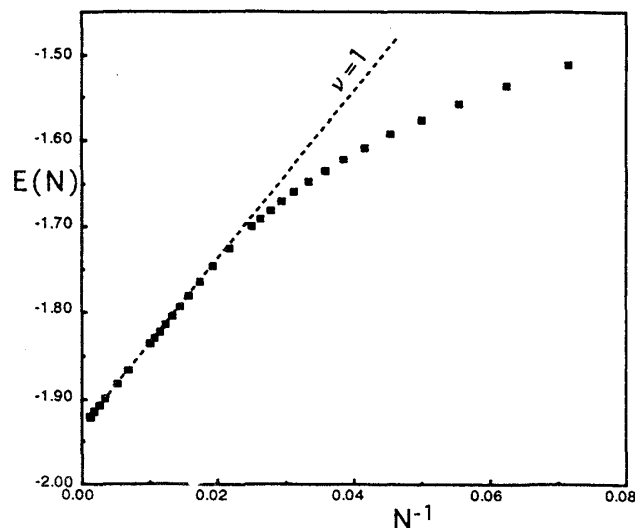


図 5.1: 領域 I で J' と J_4 に比べて J が小さいとき ($J'/J = 100, J_4/J = 100$) の単位格子面あたりのエネルギー $E(N)$ の N 依存性. N が大きくなると (図左下) 直線に乗っていて, 最近接のみの場合 ($\nu = 1$) での有限サイズスケーリングの予測と一致する.

る. 領域 I との境界に近づくときの極限は $\nu \rightarrow 0.5$ であり, 領域 IV との境界では $\nu \rightarrow \infty$ となる. 図 5.2 に描かれている 4 本の曲線は, 計算した ν の値をもとに臨界指数が一定となる線を予想したものである. 三つの領域 I, III, IV が交わる点で臨界指数一定の曲線は収束している. この点のまわりでは 3 種類の相互作用間の競合が強く, 臨界指数の値は急激に変化している. 一方, この点から遠く離れると, 臨界指数一定の曲線はある直線に近づく. この漸近線は図 5.2 に破線の矢印で表わしてある. 漸近線は J' と J_4 の比が一定の直線であり, この直線上の無限遠方での臨界指数は $J = 0$ のときの厳密解に一致する.

以上二つの領域で臨界指数を計算したが, 三つの相互作用がすべて存在する場合でも, 基底状態が強磁性の配置のみに限定される領域 I では, 普遍性が保たれていて常に $\nu = 1$ であった. 一方, SAF 配置の基底状態が 4 重に縮退している領域 III では普遍性が破れていた. この結果から, J - J' - J_4 モデルの場合にも異なる性質の基底状態が縮退していて二成分の秩序パラメータがある場合に普遍性が破れ得ることを確認できた.

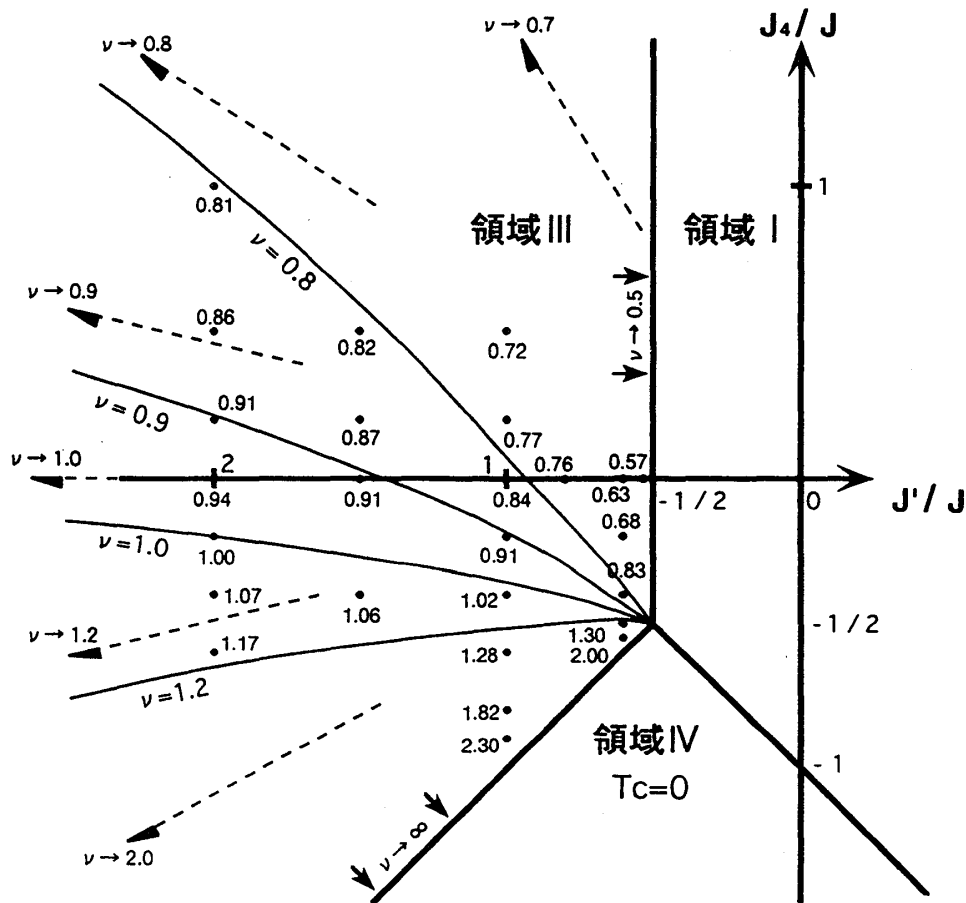


図 5.2: 領域 III 内の各点での ν の値. 4 本の曲線は, ν が一定となる線である. この曲線は破線の矢印に漸近する.

5.2 臨界指数の S 依存性

$S = \frac{1}{2}$ J - J' - J_4 モデルでは, 領域 III で相互作用の変化により普遍性が破れていた. では, この領域で臨界指数はスピンの大きさ S に依存するだろうか. まず最初に, 本田ら [22] が計算した J と J' のみ存在する場合で $S = 1$ と $S = \frac{1}{2}$ の ν の値を比較する. つぎに, $S = \frac{1}{2}$ の厳密解がある $J = 0$ のとき (J' - J_4 モデル) に, その厳密な ν の値と $S = 1$ のときの値を比べる. さいごに, 三つの相互作用すべてが存在する一般的な場合で ν の S 依存性をしらべる.

以下の計算ではどの場合も、臨界指数 ν の値は $m \rightarrow \infty$ への外挿をして評価した。外挿のさいにもちいた m の大きさは、 $S = \frac{1}{2}$ のときが $m = 64, 128, 180$ 、 $S = 1$ のときが $m = 81, 129, 180$ である。また、有限サイズスケーリングとのフィッティング誤差はすべて $m = 180$ で計算したときのものである。

最近接と次近接相互作用のみ存在するとき

$J_4 = 0$ のときに相互作用の比 $J'/|J| = -0.6, -1.0$ の 2 点でそれぞれ、 $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の場合の臨界指数 ν を求めた。温度を変えて求めた臨界指数 ν の値と、そのときの有限サイズスケーリング則とのフィッティング誤差を表 5.2 に示した。

表 5.2: $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の J - J' モデルで求めた ν の値。

	$J'/ J = -0.6$			$J'/ J = -1.0$		
	$T/ J $	ν	χ^2	$T/ J $	ν	χ^2
$S = \frac{1}{2}$	0.97155	0.61674	1.0095e-6	2.08200	0.83119	2.6111e-9
	0.97160	0.62773	3.2444e-8	2.08205	0.83695	1.8835e-10
	0.97165	0.63886	8.3548e-7	2.08210	0.84281	5.7145e-10
$S = 1$	0.769525	0.63655	1.6268e-8	1.57580	0.84554	4.2614e-9
	0.769550	0.64056	9.3648e-10	1.57585	0.84872	4.2600e-12
	0.769575	0.64453	2.8078e-8	1.57590	0.85276	5.3094e-9

フィッティング誤差が最小になる温度で ν の値を評価すると、次のようになった：

	$J'/ J = -0.6$	$J'/ J = -1.0$
$S = \frac{1}{2}$	0.628 ± 0.01	0.837 ± 0.01
$S = 1$	0.641 ± 0.01	0.849 ± 0.01

相互作用の比 $J'/|J|$ がおなじときの $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の ν の値をくらべると計算誤差の範囲内で一致しており、 ν には S 依存性がないと考えられる。

最近接と次近接相互作用のみ存在するとき

この場合は $S = \frac{1}{2}$ の厳密解があるので、 $S = 1$ の場合のみ ν を数値計算する。相互作用の比 $J_4/|J'| = 0.5, 1.0$ の 2 点で計算した。得られた結果を表 5.3 に示す。

表 5.3: $J'-J_4$ モデルの, $S = \frac{1}{2}$ の厳密な ν と $S = 1$ で求めた ν .

	$J_4/ J' = 0.5$			$J_4/ J' = 1.0$		
	$T/ J' $	ν	χ^2	$T/ J' $	ν	χ^2
$S = \frac{1}{2}$	0.82763 (exact)			0.75000 (exact)		
$S = 1$	2.1618	0.81605	3.7586e-9	2.60355	0.73928	3.5689e-8
	2.1619	0.81811	1.1262e-13	2.60360	0.74446	3.8190e-10
	2.1620	0.82247	3.2294e-9	2.60365	0.74949	4.7126e-8

$S = 1$ で得られた値は $J_4/|J'| = 0.5, 1.0$ に対してそれぞれ $0.818 \pm 0.01, 0.744 \pm 0.01$ となった. これは $S = \frac{1}{2}$ の厳密な値 0.828, 0.750 と計算誤差の範囲で一致している. この場合もやはり, ν に S 依存性がないと考えられる.

三つの相互作用が存在するとき

相互作用の比が $(J'/|J|, J_4/|J|) = (-1.0, 0.5)$ の点で比較した. 結果を表 5.4 に示す.

表 5.4: $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の $J-J'-J_4$ モデルで求めた ν の値.

	$J'/ J = -1.0, J_4/ J = 0.5$		
	$T/ J $	ν	χ^2
$S = \frac{1}{2}$	2.76815	0.71785	5.4430e-9
	2.76820	0.72126	1.1032e-9
	2.76825	0.72484	2.0331e-9
$S = 1$	2.03790	0.74043	2.1864e-9
	2.03785	0.73168	8.0913e-10
	2.03780	0.72319	7.3762e-9

得られら値は, $S = \frac{1}{2}$ のときが 0.721 ± 0.01 , $S = 1$ では 0.732 ± 0.01 である. この場合も両者は計算誤差の範囲内で等しく, ν は S に依存しないと結論できる.

以上のように, 相互作用の変化により普遍性が破れている領域 III の数点で $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ の臨界指数 ν を比較したが, どの場合も有意な差は認められなかった. $S = 1$ の値は $S = \frac{1}{2}$ の値より小さいという, 本田ら [22] が $J-J'$ モデルで得た結果は系統的計算誤差を

有為な差ととらえていると考えられる。この解析結果から、両者が完全に等しいと断定はできないが、三つの相互作用がすべて存在する場合も含めて臨界指数の値はスピンの大きさに依存しないと考えられる。

第 6 章

まとめと考察

本論文では、相互作用の変化により普遍性が破れている二つの正方格子イジングモデル (J - J' モデルと J' - J_4 モデル) を合わせて、さらに一般化したモデルを導入し、モデルのどのような性質が臨界指数の普遍性に関係しているのかをしらべた。

まず、三つの相互作用 J, J', J_4 をもつイジングモデルを導入し、CTMRG の方法を用いて臨界指数 ν の値を計算して、 ν の相互作用依存性をしらべた。その結果、4 重に縮退している SAF 状態の領域では普遍性が破れており、基底状態が F か AF のどちらかに限定される場合には普遍性が保たれていることを確認した。このモデルにおいて普遍性が破れるのは、性質が異なる基底状態が縮退していて秩序パラメータが二つの成分をもつ場合であることが検証された。

つぎに、三つの相互作用の変化により普遍性が破れている領域で $S = \frac{1}{2}$ のときと $S = 1$ のときの臨界指数 ν を計算し比較した。その結果、相互作用の比がおなじならば、 $S = \frac{1}{2}$ と $S = 1$ のときの ν の値が計算誤差の範囲内で一致し、 S 依存性がないことがわかった。このモデルでは、相互作用の比とともに臨界指数が変化する場合でも、スピンの大きさに対する普遍性は保たれていると結論される。

未解決の問題としては、温度のベキではなく相関長のベキで定義した臨界指数はパラメータによらず一定であるという弱い普遍性 (weak universality)[47] の検証があげられる。 J - J' モデルや、 J' - J_4 モデルではすでに弱い普遍性が保たれていることがわかっている [15, 47]。また、 J と J' をもつモデルでのスピンの大きさの変化に対する弱い普遍性も本田ら [22] が検証している。この弱い普遍性を、三つの相互作用が存在する領域まで含めてしらべるのが今後の課題である。

謝辞

この研究を行うにあたり、安原洋先生には研究全般にわたり適切な助言を数多くいただき深く感謝いたします。また、普段の研究生活においてもいろいろと面倒を見ていただきました。厚くお礼申し上げます。直接ご指導いただいた西野友年さん(現神戸大学理学部)には、基礎の基礎からひとつずつ平易に教えていただき、大変お世話になりました。神戸大学に移られてからも最後までていねいに指導して下さい、心から感謝いたします。研究面以外にも日頃いろいろとアドバイスいただいたことを、今後活かしていければと思います。情報科学研究科の本田泰さんには、研究の方向づけを与えて下さるとともにさまざまな質問にお答えいただき、切に感謝いたします。M1の遠藤孝徳君と堀内雅史君とはいつも研究室で有意義な時間を過ごすことができました。深く感謝いたします。

参考文献

- [1] L.D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion, **11** (1937) 26.
- [2] M.E. Fisher, in *Reports on Progress in Physics*, (Physical Society, London, 1967), Vol.30, Pt 2, p.615.
- [3] L.P. Kadanoff, W. Götze, D. Hamblen, R. Hecht, E.A.S. Lewis, V. Palciaukas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes and J.Kane, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 395.
- [4] G. Develey, Compt. Rend. **260** (1965) 4951.
- [5] R.B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **24** (1970) 1479.
- [6] B. Widom, J. Chem. Phys. **43** (1965) 3898.
- [7] L.P. Kadanoff, Physics. **2** (1966) 263.
- [8] K. Wilson, Phys. Rev. **B4** (1971) 3174,3184.
- [9] J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **39** (1977) 95.

- [10] M.N. Barber, J. of Phys. **A12** (1979) 679.
- [11] J. Otima, J. of Phys. **A14** (1981) 1159.
- [12] R.H. Swendsen and S. Krinsky, Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 177.
- [13] K. Binder and D.P. Landau, Phys. Rev. **B21** (1980) 1941.
- [14] D.P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. **B31** (1985) 5946.
- [15] K. Tanaka, T. Horiguchi and T. Morita, Prog. Theor. Phys. **115** (1994) 221.
- [16] R.J. Baxter, Ann. Phys. **70** (1972) 193.
- [17] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [18] K. Jüngling, J. Phys. **C9** (1976) L1.
- [19] S. Krinsky and D. Muhamel, Phys. Rev. **B16** (1977) 2313.
- [20] K. Minami and M. Suzuki, Physica **A195** (1993) 457.
- [21] H.W.J. Blöte and M.P. Nightingale, Physica **134A** (1985) 274.
- [22] Y. Honda, K. Tanaka and T. Horiguchi, Phys. Rev. **B51** (1995) 15260
- [23] R.H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **42** (1979) 859.
- [24] M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 4205.
- [25] M. Suzuki, Phys. Lett. **A116** (1986) 375.
- [26] T. Nishino and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891.
- [27] T. Nishino, K. Okunishi and M. Kikuchi, Phys. Lett. **A213** (1996) 69.
- [28] 奥西 巧一, 修士論文 大阪大学 1996 年.
- [29] R.J. Baxter, J. Math. Phys. **9** (1968) 650.
- [30] R.J. Baxter, J. Stat. Phys. **19** (1978) 461.

- [31] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863.
- [32] S.R. White, Phys. Rev. **B48** (1993) 10345.
- [33] M.E. Fisher, in *Proceedings of the International Summer School Enrico Fermi 1970, Course 51, Varenna, Italy*, ed. M.S. Green (Academic Press, New York, 1971) p.1.
- [34] M.N. Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb and J.L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983), Vol.8, p.146.
- [35] G.S. Rushbrooke, J. Chem. Phys. **39** (1963) 842.
- [36] R.B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **14** (1965) 623.
- [37] W. Lenz, Phys. Z. **21** (1920) 613.
- [38] E. Ising, Z. Phys. **31** (1925) 253.
- [39] R. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. **32** (1936) 477.
- [40] H.A. Kramers and G.H. Wannier, Phys. Rev. **60** (1941) 252.
- [41] L. Onsager, Phys. Rev. **65** (1944) 117.
- [42] C.N. Yang, Phys. Rev. **85** (1952) 808.
- [43] C.H. Chang, Phys. Rev. Lett. **88** (1952) 1422.
- [44] N.W. Dalton and D.W. Wood, J. Math. Phys. **10** (1969) 1271.
- [45] R.W. Gibberd, J. Math. Phys. **10** (1969) 1026.
- [46] B.J. Hiley and G.S. Joyce, Proc. Phys. Soc. **85** (1965) 493.
- [47] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **51** (1974) 1992.